

UNIVERSIDAD TECNOLÓGICA DE BOLÍVAR  
FACULTAD DE INGENIERÍA

Título: EVALUACIÓN DEL FENÓMENO DE DIE SWELL EN MEZCLAS DE  
ALMIDÓN DE YUCA Y POLY (ÁCIDO LÁCTICO) EN EL PROCESO DE  
EXTRUSIÓN

Autor: MARY JUDITH ARIAS TAPIA

---

Firma del jurado

---

Firma del jurado

---

Firma del jurado

Cartagena, Octubre 6 de 2017

EVALUACION DEL FENOMENO DE DIE SWELL EN MEZCLAS DE ALMIDON  
DE YUCA Y POLY (ACIDO LACTICO) EN EL PROCESO DE EXTRUSION

MARY JUDITH ARIAS TAPIA

Director:

JAIRO FRANCISCO USECHE VIVERO Ph.D.

Universidad Tecnológica de Bolívar  
Facultad de Ingeniería  
Maestría en Ingeniería  
Cartagena, Colombia

Octubre 6 de 2017

EVALUACION DEL FENOMENO DE DIE SWELL EN MEZCLAS DE ALMIDON  
DE YUCA Y POLY (ACIDO LACTICO) EN EL PROCESO DE EXTRUSION

MARY JUDITH ARIAS TAPIA

Trabajo de Grado para optar al título de

Magister en Ingeniería  
Énfasis en Ingeniería Mecánica

Director:

JAIRO FRANCISCO USECHE VIVERO Ph.D.

Universidad Tecnológica de Bolívar  
Facultad de Ingeniería  
Maestría en Ingeniería  
Cartagena, Colombia

Octubre 6 de 2017

## Resumen

En este trabajo se estudió el comportamiento de las mezclas TPS/PLA y sus materiales constituyentes, utilizando la combinación de técnicas de simulación por Dinámica Molecular para caracterización reológica y modelado analítico y numérico, para estudio del comportamiento de los materiales en estudio durante el proceso de extrusión y el fenómeno de “die-swell”. Lo anterior, permitió profundizar en el conocimiento del comportamiento de los materiales alternativos, en este caso polímeros biodegradables que permitan reemplazar a los polímeros tradicionales provenientes del petróleo en aplicaciones específicas y que al final de su vida útil, estos puedan ser biodegradados y de esta manera ayudar a reducir la contaminación por volumen. Además, la implementación de simulación, ayudaría en gran medida, a predecir el comportamiento de estos materiales, reduciendo costos y tiempo en la implementación de ensayos experimentales. Los resultados obtenidos, en este trabajo son una clara muestra que el nuevo campo de trabajo que se abre con los materiales biodegradables alternativos, esta aun por explorar, puesto que tanto los modelos como las técnicas de simulación están planteados para los materiales tradicionales provenientes del petróleo, lo que hace que se requieran ajustes en algunos parámetros, para poder entender de manera clara el comportamiento de los nuevos polímeros. Teniendo en cuenta lo anterior, se hace necesario aun, poder comparar con resultados experimentales, que permitan validar los resultados obtenidos por la simulación y los modelos utilizados.

## **Agradecimientos**

A Dios por permitirme levantarme cada día con ánimos para seguir adelante en este proyecto, a pesar de los muchos tropiezos que hubo durante el desarrollo de este.

A mis padres, que gracias a sus esfuerzos, confianza y apoyo incondicional he podido cumplir cada uno de mis metas.

A mi asesor, el profesor Jairo Useche, por confiar en mi desde el principio hasta el final de este trabajo, por permitirme hacer este proyecto de grado en el área de mi interés y por hacerme entender que ningún reto es insuperable si se trabaja con disciplina y empeño.

Al Ing. Guillermo Giraldo, quien se convirtió en mi mano derecha por su apoyo, colaboración y guía en cada etapa de este proceso.

Al Ing. Luis Alejandro Paternina, por su colaboración y paciencia diaria, lo que hizo posible que este proyecto se pudiera concluir.

A Jovani L. Favero, PhD (Federal University of Rio de Janeiro, RJ, Brazil), por apoyo, confianza y autorización para utilizar el Software ViscoelasticInterFoam Solver, en el desarrollo de este trabajo.

Al Profesor Yuichi Masubuchi (Professor, National Composite Center, Nagoya University, JAPAN), por su apoyo y acompañamiento en el uso del Software OCTA, utilizado en el desarrollo de este trabajo.

A los estudiantes: María E. Gómez, Osvaldo Molina, Luigi Herrera y Natalia Poveda del Programa de Ingeniería Química de la Universidad Tecnológica de Bolívar, por animarme cada día a seguir adelante en este proyecto.

A Farick Tanus, Kelibeth Pereira, Jennifer Palomino, Julieth Álvarez Lara, Carmen Alicia Martínez, Rafael Ordoñez Villareal, Lewis Villalobos, Fabiola Tapasco Gómez, Dalis Pérez Fortich y Karen Cuesta; por su apoyo constante e incondicional en los momentos más difíciles.

## **Índice general**

1.Introduccion	10
1.1Planteamiento de problema	10
1.2 Justificación	10
1.3 Estado del arte	11
1.4 objetivos	15
1.4.1 objetivo General	15
1.4.2 Objetivos Específicos	15
2. Marco teórico	16
3. Métodos	33
4. Resultados y discusión	46
5.Conclusiones y recomendaciones	75
Bibliografía	78
Anexos	82

## Lista de figuras

Figura 1. Representación esquemática del Modelo Slip-Link, a) disposición de las cadenas de un polímero real y b) cadenas poliméricas dispuestas de acuerdo al Modelo Slip-Link.	16
Figura 2. Representación del camino primitivo y Slip-Links.	17
Figura 3. Comportamiento típico de un fluido Pseudoplástico típico.	21
Figura 4. Geometría de un tornillo de extrusora.	23
Figura 5. Geometría del canal rectangular del tornillo desenrollado.	23
Figura 6. Bosquejo de un extruido expandido, mostrando un recogimiento elástico.	28
Figura 7. Proceso para estudio del comportamiento de las mezclas TPS/PLA y materiales constituyente, durante el proceso de extrusión.	32
Figura 8. Metodología general para el estudio mezclas TPS/PLA y sus materiales constituyentes.	33
Figura 9. Esquema para caracterización reológica y comportamiento de los materiales fundidos.	36
Figura 10. Modelamiento de la geometría del dado de extrusión.	43
Figura 11. Enmallado de la geometría del dado de extrusión.	43
Figura 12. Mezcla F2 (60% GTPS/ 40% PLA) en el $t = 0$ s.	47
Figura 13. Mezcla F2 (60% GTPS/ 40% PLA) en el $t = 4$ s.	47
Figura 14. Mezcla F2 (60% GTPS/ 40% PLA) en el $t = 7$ s.	47
Figura 15. Mezcla F2 (60% GTPS/ 40% PLA) en el $t = 10$ s.	48
Figura 16. Comportamiento de la Viscosidad ( $\eta^*$ ) Vs la Frecuencia ( $\omega$ ), de las mezclas GTPS/PLA y los materiales constituyentes GTPS y PLA.	49
Figura 17. Módulo de almacenamiento ( $G'$ ) mezclas GTPS/PLA.	52
Figura 18. Módulo de pérdida ( $G''$ ) de mezclas GTPS/PLA.	54
Figura 20. Comportamiento de flujo de las mezclas TPS/PLA fundidas en la extrusora.	56
Figura 21. Comparación de Modelos Analíticos y Numéricos, para el comportamiento de la Velocidad de flujo Vs ancho del canal, fijando la profundidad del canal.	57
Figura 22. Comparación de Modelos Analíticos y Numéricos, para el comportamiento de la Velocidad de flujo Vs profundidad del canal, fijando el ancho del canal.	58
Figura 23. Comparación de Modelos Analíticos y Numéricos, para el comportamiento del Caudal Vs Angulo de Hélice del tornillo, fijando la velocidad del tornillo.	59

Figura 24. Comparación de Modelos Analíticos y Numéricos, para el comportamiento del Caudal Vs Velocidad del tornillo, fijando el ángulo de hélice del tornillo.	59
Figura 25. Comportamiento de la velocidad de flujo a lo ancho del canal del tornillo, con variación de la profundidad de canal del tornillo.	60
	61
Figura 26. Comportamiento de la velocidad de flujo en la profundidad del canal del tornillo, con variación del ancho del canal.	
Figura 27. Comportamiento del caudal ( $Q_z$ ), respecto a la velocidad angular del tornillo, para un Angulo de hélice.	63
Figura 28. Comportamiento del caudal ( $Q_z$ ), respecto al ángulo de hélice ( $\phi$ ), para un valor de la velocidad angular del tornillo.	64
Figura 29. Perfil de Presión, en dirección del movimiento del flujo, obtenido por el Modelo de Tadmor.	65
Figura 30. Perfil de Presión, en dirección del movimiento del flujo, obtenido por el Modelo de Li-Hsieh.	65
Figura 31. Primera diferencia de esfuerzos normales Vs Esfuerzo de corte.	67
Figura 32. Comportamiento del Die-Swell Vs Esfuerzo de Corte.	68
Figura 33. Comportamiento del LDPE en la extrusora.	69
Figura 34. Die Swell del LDPE justo a la salida del dado.	69
Figura 35. Comportamiento de $N_1$ Vs $\tau$ , la mezcla F2.	71
Figura 36. Comportamiento de B (Die Swell) Vs $\tau_w$ .	72
Figura 34. Comportamiento de la mezcla fundida F2 al salir del dado de extrusión según modelado CFD.	72



## Lista de tablas

Tabla 2. Parámetros de entrada para simulación por PASTA.	36
Tabla 3. Formulaciones de mezclas TPS/PLA.	38
Tabla 4. Parámetros de entrada para simulación por PASTA.	39
Tabla 7. Densidad de mezclas TPS/PLA y materiales constituyentes.	46
Tabla 8. Fracción volumen de mezclas TPS/PLA y materiales constituyentes.	46
Tabla 12. Valores de los parámetros de entrada al software PASTA, para caracterización reológica.	47
Tabla 13. Valores de viscosidad de PLA reportados en la literatura Vs PASTA.	51
Tabla 14. Valores de viscosidad de PLA reportados en la literatura Vs PASTA.	51
Tabla 15. Comparación de la variación porcentual de la viscosidad cero de mezclas GTPS/PLA y PLA.	52
Tabla 16. Comparación de Módulos de almacenamiento ( $G'$ ) de las mezclas GTPS/PLA.	54
Tabla 17. Comparación de Módulos de pérdida ( $G''$ ) de mezclas GTPS/PLA.	56
Tabla 18. Parámetros de entrada del LDPE para el Modelo de Brandao-Spieth- Lekakou	67
Tabla 19. Geometría del dado (C.W. Brabender) No. 05-54-000 Horizontal.	67
Tabla 20. Parámetros de entrada para el Modelo de Brandao-Spieth-Lekakou.	71
Tabla 21. Valores de constantes empíricas para el modelo de Brandao-Spieth-Lekakou.	72

# **Capítulo 1.**

## **1. Introducción**

### **1.1 Planteamiento del problema**

¿Se pueden predecir las características reológicas del comportamiento de las mezclas de polímeros biodegradables durante el proceso de extrusión, utilizando modelos matemáticos y numéricos?

### **1.2 Justificación**

La necesidad de suplir la demanda que la sociedad actual requiere de los productos hechos de poliméricos tradicionales, conlleva al aumento gradual de su producción, y por ende a hacer uso óptimo de las materias primas y de la energía, para el funcionamiento de las maquinas extrusoras de tornillo único (Zavadsky et al., 1985), permitiendo el constante avance en las investigaciones, para mejorar los diseños existentes de estas máquinas.

Sin embargo, la alta contaminación por volumen, producto del uso excesivo de poliméricos tradicionales, ha llevado a buscar materiales alternativos, que sean fácilmente degradables al final de su vida útil. Teniendo en cuenta lo anterior, no es de sorprenderse que el proceso de extrusión haya sido objeto de estudio para su entendimiento físico y modelamiento matemático, así como también en la implementación de tecnología innovadora para su monitoreo y optimización (Covas et al., 2001), para el procesamiento de los nuevos materiales.

Con este trabajo se busca predecir el comportamiento de estos nuevos materiales alternativos, utilizando modelos matemáticos desarrollados para el estudio del comportamiento de los polímeros tradicionales en la extrusora de tornillo único, que permitan encontrar condiciones de operación y características del equipo antes de ser implementados un proceso de producción real, lo que ayudaría a reducir incertidumbre, tiempo y costos, en la implementación y operación del proceso de producción para fines comerciales.

### 1.3 Estado del arte

Las extrusoras de tornillo único son extensamente usadas, debido a su bajo costo, confiabilidad y comportamiento satisfactorio (Ghany et al., 2015). Según Li et al., (1996), de todos los tipos de extrusoras utilizadas en la industria, las extrusoras de tornillo único son ciertamente un tipo que no puede ser pasado por alto. Todos los estudios han llevado al desarrollo significativo de modelos matemáticos, que permitan entender las relaciones entre la geometría, condiciones de operación y comportamiento del tornillo (Covas et al., 2001), con el objetivo de obtener el máximo rendimiento durante el proceso de extrusión, teniendo en cuenta la temperatura, la presión y viscosidad optimas del material procesado (Zavadsky et al., 1985).

La Teoría Hidrodinámica de las extrusoras de tornillo inicia con Rowell et al., (1922, 1928) (Li et al., (1996), Rauwendaal (1986) y Vinicius et al., (2009)), aunque muchos otros enfoques se intentaron más adelante, estos resultarían ser equivalentes a los de los pioneros. Más adelante Shapiro et al., (1976), argumenta que no hay un modelo matemático totalmente satisfactorio que describa el proceso de fusión del polímero en una extrusora de único tornillo.

Zavadsky et al., (1985) presenta un modelo matemático no unificado, en que la extrusora es dividida en 5 zonas, donde cada una presenta características físicas propias del proceso, pues la escogencia del modelo matemático adecuado para cada zona depende del proceso físico que se lleva a cabo en cada una de estas.. Lo anterior está basado en las teorías propuestas por Klein (1965), McKelvey (1962), Schneider (1969) y Tadmor et al, (1972).

En su afán por explicar el proceso de extrusión, Campell et al., (1992), diseñó un tornillo especial de extrusora para probar la existencia del flujo de arrastre, considerando que: 1) solo el barril rota, 2) solo el núcleo del tornillo rota, 3) solo las aletas del tornillo roten y 4) el núcleo y las aletas del tornillo roten al tiempo. De este trabajo se concluyó, que el flujo generado por la rotación del tornillo no está de acuerdo con las teorías existentes hasta ese momento y que las aletas del tornillo son las mayores contribuyentes del flujo de arrastre.

En 1996 Li et al., propone una nueva solución analítica para un flujo isotérmico Newtoniano en una extrusora de tornillo único, teniendo en cuenta condiciones de contorno reales, es decir tornillo rotatorio y barril estacionario. Contrarias a las condiciones utilizadas hasta ahora en los modelos de Tadmor et al., (1979) y Rauwendaal (1986), que se basaron en la Teoría Hidrodinámica propuesta por Rowell et al., (1922, 1928), en las cuales el tornillo es estacionario y el barril giratorio.

A comienzos del año 2.000, los investigadores utilizan mayormente técnicas de simulación numérica, para ser comparadas con los modelos analíticos propuestos hasta la época, como en el caso de Useche (2002), que utiliza un modelo computacional de Elementos Finitos y lo compara con el modelo de Tadmor et al., (1979), para explicar el comportamiento hidrodinámico del polímero fundido en extrusoras de tornillo único. Por su parte Yu et al., (2004), utiliza técnicas de simulación numérica y lo compara con el modelo propuesto por Rowell et al., (1922) y por Li et al., (1996), para determinar el comportamiento del campo de flujo y la transferencia de calor en los canales del tornillo de la extrusora, encontrando que el modelo de Li et al., (1996), se asemeja a los resultados arrojados por la simulación numérica.

De otro lado Surest et al., (2008) y Vinicius et al., (2009); utilizan el modelo de Li et al., (1996), para estudiar el comportamiento del flujo en el canal de la extrusora cuando el polímero (polipropileno) es degradado por acción de Peróxido, y cuando se varían los espacios entre las aletas del tornillo para valores pequeños, medianos y grandes; respectivamente.

Siguiendo con el análisis computacional Vlachopoulos et al., (2011), estudia el comportamiento del fluido en la extrusora con el fin de hallar un diseño óptimo del tornillo, dividiendo la extrusora en 5 zonas (alimentación, transporte de sólidos, fundido, transporte de fundido y dado), utilizando el modelo de Tadmor et al., (1979), para estudiar el comportamiento del fluido en la zona de fundido. También Mihailona et al., (2014), estudia la zona del fundido de la extrusora, intentando proponer una nueva teoría para explicar el comportamiento del material en los canales del tornillo, pero termina recurriendo al modelo de Tadmor et al., (1979) para basar sus supuestos.

Más recientemente Ghany et al., (2015), utiliza técnicas de simulación numérica, para estudiar la relación de la geometría y velocidad rotacional del tornillo, con la presión axial del fluido dentro del barril de la extrusora. Este basa su análisis en el modelo de Tadmor y Klein (1970), para la zona de fundido, pues al igual que Covas et al., (2001), Shapiro et al., (1976), Vlachopoulos et al., (2011) y Zavadsky et al., (1985), divide la extrusora en varias zonas para un mejor estudio.

Otro de los temas que será tratado en este trabajo es el fenómeno de “*die-swell*” o efecto Barus, que es común en la extrusión de polímeros. Lodge (1955), muestra teóricamente como una pieza de material exhibe un recogimiento elástico y un hinchamiento oblicuo cuando se libera del esfuerzo instantáneamente, y como un pequeño y lento recogimiento es promovido, en el cual el diámetro del extruido es

mayor al diámetro del canal del dado, provocando un cambio de dimensiones en el extruido, diferentes a la esperadas.

Más adelante Graessley (1969) y Nakjima (1966), coinciden en el énfasis de sus trabajos, concluyendo que el recogimiento elástico es el aspecto más importante en el proceso de “*swelling*”. Sin embargo, teorías posteriores introducen un módulo elástico, el cual no está conectado en forma obvia para dar una relación continua con otras propiedades materiales medibles, por lo tanto, hace que no haya un poder de predicción aún. Teniendo en cuenta las investigaciones anteriores, hasta 1970 aparentemente no se tiene una teoría fundamental de “*die-swell*” en el sentido que, dadas las propiedades de un material, se pueda predecir el avance de este fenómeno. Por su parte Tanner (1970), presenta su Teoría de Recogimiento Elástico, basada en los trabajos de Lodge (1955, 1964), Kaye (1962) y Zapas (1963), con la cual pretende explicar el fenómeno en estudio.

Por su parte Henderson et al., (1986), encuentra relación entre la temperatura y “*die-swell*”, puesto que al pasar un polímero fundido caliente por el dado frío, sufre un incremento sustancial en sus dimensiones, produciendo hinchamiento, desenredo molecular de las cadenas poliméricas y reducción de la elasticidad del material. De otro lado Brandao et al., (1996), considera algunos parámetros reológicos como la tasa de corte, índice de flujo y temperatura, para estudiar el fenómeno de “*die-swell*”. Este trabajo modela matemáticamente este fenómeno, basado en la Teoría de Recogimiento Elástico de Tanner (1970), incluyendo contribuciones elásticas y newtonianas del polímero.

En 1997, Sirisinha; hace una revisión de los factores que gobiernan el fenómeno del “*die-swell*”, incluyendo cálculos de deformación recuperable y tiempo de relajación, llegando a la conclusión que este fenómeno es controlado por la elasticidad del fundido, pero que también depende de factores como: temperatura, esfuerzo de corte, geometría del dado y características moleculares del polímero. Por su parte Liang (2001), estudia la relación de las pérdidas por caída de presión a la salida del dado, el esfuerzo de corte en las paredes del dado y el “*die-swell*”, mostrando que la relación propuesta tiene un buen acercamiento a los valores medidos experimentalmente.

De otro lado, además de los modelos analíticos, se tienen en cuenta los modelos viscoelásticos, implementados en modelos numéricos para el estudio del fenómeno de “*die-swell*”. Favero et al., (2010), Holmes et al., (2012), Mu et al., (2012), son algunos de los autores que han implementado las ecuaciones constitutivas de los modelos viscoelásticos a modelos numéricos por CFD (Computacional Fluid

Dynamic), para estudiar el comportamiento de polímeros tradicionales o mezcla de ellos. Más recientemente Cherizol et al., (2015), hace una revisión de modelos matemáticos para fluidos No-Newtoniano de compuestos Viscoelásticos, encontrando que los modelos más adecuados para la predicción del comportamiento reológico de biomateriales compuestos reforzados con fibras naturales, son los modelos de Phan-Thien-Tanner, Oldroyd-B, K-BKZ, Maxwell y Giesekus.

Teniendo en cuenta la anterior revisión de la literatura, se encuentra que no existe un modelo único para estudiar el comportamiento de fluidos No-Newtonianos en una extrusora de tornillo único, pero la mayoría de investigaciones han sido basados en el modelo de Tadmor et al., (1966, 1967, 1970, 1972 y 1979), siendo este uno de los más utilizados hasta ahora, a pesar de los errores encontrados por Li y Hsieh (1994, 1996) en este modelo. De otro lado, se encuentra que a pesar de los muchos autores han propuesto modelos para estudiar el fenómeno del “*die swell*”, estos han basado su trabajo en la Teoría de Recogimiento Elástico de Tanner.

En este trabajo, serán empleados los modelos de Tadmor et al., (1976) y Li et al., (1996), y Alves et al., (2009) para estudiar analíticamente el comportamiento de mezclas de Almidón de Yuca y Poli Ácido Láctico (PLA) fundidas dentro la extrusora de tornillo único y el Modelo Brando-Spieth-Lekakou (1996), para estudiar el fenómeno de “*Die Swell*”. También se pretende estudiar este fenómeno de manera numérica, implementando las ecuaciones constitutivas de Maxwell, que hasta el momento solo se ha implementado para polímeros tradicionales.

## **1.4 Objetivos**

### **1.4.1 Objetivo General**

Estudiar el comportamiento de mezclas de Almidón de Yuca (TPS) y Poli Ácido Láctico (PLA), utilizando modelos analíticos y simulación numérica para predecir su respuesta mecánica durante el proceso de extrusión.

### **1.4.2 Objetivos Específicos**

- Evaluar las características reológicas de mezclas de TPS/PLA y sus materiales constitutivos, utilizando simulación computacional para materiales blandos, basada en Dinámica Molecular.
- Predecir el comportamiento de las variables presión y flujo volumétrico en el proceso de extrusión para mezclas TPS/PLA, utilizando modelos computacionales basados en el Método de Diferencias Finitas.
- Evaluar los modelos analíticos propuestos en la literatura con modelos numéricos para proceso de extrusión de las mezclas TPS/PLA.
- Estudiar el fenómeno de “*die-swell*” en mezclas TPS/PLA, mediante la implementación de modelos analíticos y computacionales basados en el Método de Volúmenes Finitos.

## **Capítulo 2.**

### **2.1 Marco Teórico**

#### **2.1.1 Aplicación de La Dinámica Molecular a la Reología de polímeros**

En el campo de la Ingeniería de materiales, la simulación computacional es una herramienta que genera gran expectativa en el desarrollo de nuevos materiales, que requieren propiedades y condiciones de procesamiento específicas, que permitirían predecir estas, usando información de la estructura y composición química de los materiales (Aoyagi, 2016). En el caso de los polímeros, estos representan un gran reto para los modeladores de materiales, debido las relaciones complejas de sus propiedades viscoelásticas (Kremer et al., 2005), ya que su estructura y dinámica son caracterizadas por un espectro de longitud y escala de tiempo extremadamente grande (Tzoumanekas et al., 2006). Teniendo en cuenta lo anterior, surge la simulación por Dinámica Molecular, la cual tiene como objetivo modelar completamente sus propiedades reológicas, usando las fuerzas involucradas, describiendo el cambio de posición, velocidad y orientación de la cadena polimérica, con el paso del tiempo, mientras son sometidos a estímulos de temperatura, presión, esfuerzos, etc., (Haile, 1992) y Palmer (2012).

##### **2.1.1.1 Modelo de Enlace Deslizante (Slip-Link Model)**

El Modelo de Enlace Deslizante (*Slip-Link Model*), hace parte al conjunto de modelo que utiliza la dinámica molecular, para explicar el comportamiento interno de los polímeros (Aoyagi, 2016) y (Palmer, 2012). Para entender este modelo, se debe partir del Modelo de Cadena Ideal, el cual no tiene en cuenta el volumen, ni las interacciones entre las moléculas, pero aun así este modelo es adecuado para reproducir la estructura en equilibrio de un polímero en estado fundido (Staudinger et al., (1932), Green et al., (1946) y Doi et al., (1978).



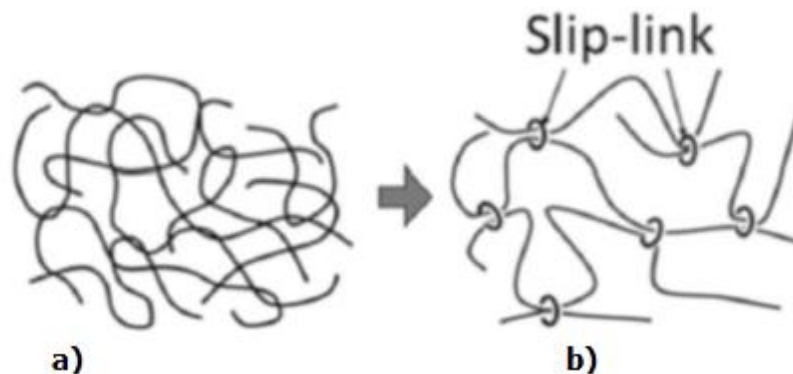


Figura 1. Representación esquemática del Modelo Slip-Link, a) disposición de las cadenas de un polímero real y b) cadenas poliméricas dispuestas de acuerdo al Modelo Slip-Link. Tomado y modificado de Japan Association for Chemical Innovation (2016).

A diferencia de lo anterior, los polímeros reales presentan enredos de moléculas, lo cual es sumamente importante al estudiar los polímeros fundidos (Aoyagi, 2016); es por esto que se usa el Modelo de *Slip-Links*, pues considera puntos de enredo como enlaces deslizantes y las cadenas entre puntos de enredos como simples resortes (Aoyagi, 2016) y Takimoto et al., (2000). Adicionalmente, dos cadenas están conectadas por un *slip-links*, para formar un par, y así representará un enredo, los cuales se forman o se destruyen por el movimiento de la cadena polimérica (Aoyagi, 2016), tal como se muestra en la figura 1.

En el Modelo Slip-Link, se tienen en cuenta las variables, de posición del slip-link ( $R$ ), número de segmentos de Kuhn entre enredos ( $n$ ) y el número de slip-links sobre cada cadena ( $Z$ ), donde  $r_z$ , representan los vectores posición de los slip-links ( $r_1, r_2 \dots r_Z$ ), y  $s_1$  y  $s_2$ , la longitud de los segmentos de línea en ambos extremos, lo cual se representa en la figura 2. (Masubuchi, 2016). Según Doi et al., (2003), Shoji (2002) y Tzoumanekas et al., (2006); en el método utilizado para la simulación de polímeros lineales, se tienen en cuenta 4 operaciones, como se muestran a continuación.

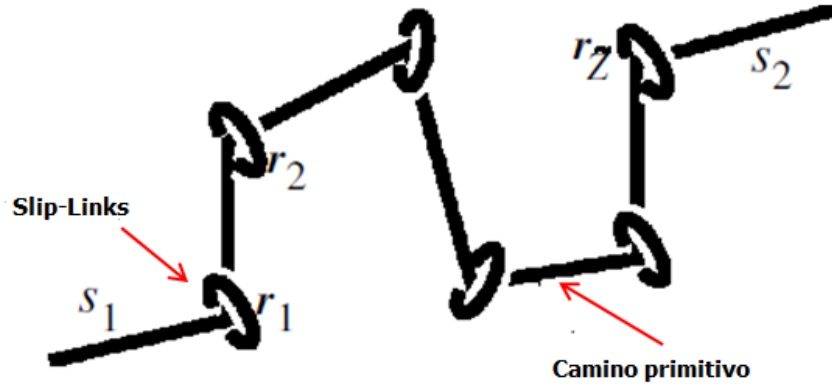


Figura 2. Representación del camino primitivo y *Slip-Links*. Tomado y modificado de Japan Association for Chemical Innovation (2016).

### Primera Operación: Deformación paralela debido al flujo

Cada posición del Slip-Links ( $r_i$ ) es movido de acuerdo al flujo macroscópico de la muestra.

### Segunda Operación: Cambio de la longitud de contorno del camino primitivo (Fluctuación de la longitud de contorno).

La longitud  $L$  de cada camino primitivo es actualizada a  $L + \Delta L$  por cambios en las longitudes de las colas  $s_1$  y  $s_2$  la misma cantidad  $\Delta L/2$ . Donde  $\Delta L$  es determinada desde la ecuación de Langevin y el paso del tiempo  $\Delta t$ , como:

$$\frac{dL}{dt} = -\frac{1}{\tau_R} (L(t) - L_{eq}) + g(t) + \left(\frac{dL}{dt}\right)_{paralela} \quad (2.1)$$

Dónde:  $\left(\frac{dL}{dt}\right)_{paralela}$  es el cambio de la longitud de contorno debido a la deformación paralela;  $g(t)$  es la variable aleatoria que representa la fluctuación de la longitud de contorno. El tiempo de relajación de Rouse, está dado por  $\tau_R = \tau_e Z^2$  y  $\tau_e$ , es la unidad de tiempo (el tiempo de relajación de Rouse de una cadena cuyo peso molecular es  $M_e$ ).

### Tercera Operación: Reptación

Cada camino primitivo es aleatoriamente desplazado a lo largo de sí mismo con el coeficiente de difusión  $D_c$ . Por esta operación, ya sea que incremente  $s_1$  y decrezca  $s_2$ , o viceversa.

$$D_c = \frac{a^2}{(3\pi^2\tau_e Z)} \quad (2.2)$$

### Cuarta Operación: Renovación de restricciones

Si  $s_1$  (o  $s_2$ ), se convierte en negativo por las operaciones 2 y 3, el último slip-link en la cadena y su compañero son removidos. Si de otro lado  $s_1$  (o  $s_2$ ), se hacen más largos que  $a$ , un nuevo slip-link es creado en el extremo y su compañero es creado en una cadena seleccionada aleatoriamente.

Según Masubuchi (2016), para una configuración dada de la cadena, el Tensor de Esfuerzos ( $\sigma_{xy}$ ) es calculado por:

$$\sigma_{xy} = \frac{3\nu k_B T n_0}{a^2} \left[ \frac{r_{ix} r_{iy}}{n} \right] \quad (2.3)$$

Donde  $r$  es el vector posición (con componentes  $r_x, r_y$  y  $r_z$ ),  $a$  es el la longitud promedio de la subcadena en equilibrio,  $n$  es número de segmentos de Kuhn sobre la subcadena,  $n_0$  es el promedio de segmentos de Kuhn ( $n$ ) bajo equilibrio,  $\nu$  es el numero densidad de subcadenas,  $k_B$  es la constante de Boltzmann,  $T$  es la temperatura y  $\left[ \frac{r_{ix} r_{iy}}{|r_i|} \right]$  indica el promedio del conjunto de las cadenas.

En caso de tener polímeros ramificados, se usan solo las operaciones 1,2 y 4; saltando la operación 3. Cabe anotar que, con este modelo, el número de ramificaciones no tiene efecto sobre la reológica del polímero ramificado (Doi et al., 2003).

En general para los Modelos Slip-Links, los parámetros bases son: 1) la unidad de longitud, 2) unidad de tiempo y 3) unidad de energía. La unidad de longitud ( $a$ ), es el promedio de la longitud de la subcadena en el equilibrio. La unidad de tiempo ( $\tau_R$ ), es el tiempo de relajación de Rouse de la subcadena que contiene ( $n_0$ ) segmentos de Kuhn y la unidad de energía es  $k_B T$ . Para casos prácticos, se utilizan otros parámetros como son: 1) la unidad de peso molecular, 2) unidad de módulos y 3) la unidad de tiempo.

El numero promedio de enredos por cadena (bajo equilibrio)  $Z_0$ , representan el peso molecular  $M$  de la cadena polimérica.

$$Z_0 = \frac{M}{M_K n_0} \quad (2.4)$$

donde,  $n_0$  es el promedio del número de segmentos de Kuhn en la subcadena bajo el equilibrio y  $M_K$ , es el peso molecular de los segmentos de Kuhn. Para el caso de soluciones (soluciones con enredos),  $n_0$  depende de la concentración del polímero.

Por conveniencia,  $Z_0$  es obtenido desde le Modulus Plateau ( $G_N$ ), mediante la ecuación:

$$\frac{4}{5} Z_0 = \frac{G_N}{\rho RT} M \quad (2.5)$$

donde,  $\rho$  es la densidad del polímero,  $R$  es la constante universal de los gases y  $T$  es la temperatura en cualquier tiempo.

El Modulo Unidad ( $G_0$ ), es necesaria para los cálculos reológicos. Este módulo puede obtenerse desde la unidad de longitud y la unidad de energía. Mientras tanto, por conveniencia este parámetro puede también ser obtenido por el módulo plateau (hallado en la literatura o experimentalmente). El Modulo Unidad ( $G_0$ ), puede ser calculado, de la siguiente manera:

$$G_0 = \frac{15}{4} G_N = 3 \frac{\rho RT}{M_e^G} \quad (2.6)$$

$$M_e^G = 218 \rho p^3 \quad (2.7)$$

$$p = \frac{M}{\langle R^2 \rangle \rho N_A} \quad (2.8)$$

Donde,  $M_e^G$  es el peso molecular del enredo (propuesto por Graessley);  $p$  es la longitud de empaquetamiento;  $\langle R^2 \rangle$  es el promedio de la distancia al cuadrado medida de extremo a extremo el cadena polimerica;  $\rho$  es la densidad del polímero fundido y  $N_A$  es el numero de Avogadro.

La Unidad de tiempo, esta determinada por el tiempo de relajacion de Rouse ( $\tau_R$ ), dado por:

$$\tau_R = \tau_e Z^2 \quad (2.9)$$

donde  $\tau_e$ : tiempo de relajación de Rouse para el enredo y  $Z$ : numero promedio de enredos por cadena.

### 2.1.2 Comportamiento de polímeros fundidos

El hecho que la viscosidad del polímero fundido se reduzca (figura 3), durante el proceso de extrusión, es de gran importancia; por esta razón es necesario poder expresar y entender las distintas formas de la dependencia de la viscosidad ( $\eta$ ) con la velocidad de deformación aplicada o resultante ( $\dot{\gamma}$ ), y además como estas variables son afectadas por la temperatura, estructura, composición, etc. Para ello han surgido modelos (ecuaciones empíricas, semiempíricas o de origen molecular) como son: The Power Law Model, Modelo de Ellis, Modelo de Brid-Carreau, Modelo de Cross-Porwer Law, Fluido de Bingham, Modelo de Herschel-Bulkley, entre otros (Han, 1981) (Morrison, 2001) (Osswald et al., 2015).

Estos modelos tienen dos propósitos generales: 1) soluciones analíticas para los distintos escenarios de flujos encontrados en el procesamiento de polímeros y 2) permitir el almacenamiento de los datos obtenidos en las mediciones con un número mínimo de parámetros. El comportamiento de flujo de los diferentes fluidos, requiere usar diferentes modelos; puesto que algunos fluidos pueden ser de corte adelgazante, otros podrían experimentar un esfuerzo de inicio o exhibir ambos comportamientos (Osswald et al., 2015). (Tadmor et al., 1979) (Rao, 2014) (Rauwendaal, 2014).

El Modelo de la Ley de Potencia (The Power Law Model), representa adecuadamente la región de corte adelgazante en una gráfica de viscosidad Vs rata de corte, ignorando la meseta Newtoniana (plateau Newtonian), donde se observan pequeñas velocidades de deformación (Osswald et al., 2015). Este se describe como:

$$\eta = m\dot{\gamma}^{n-1} \quad (2.12)$$

$$\eta = m(T)\dot{\gamma}^{n-1} \quad .. \quad (2.13)$$

Donde,  $m$  representa el Índice de Consistencia y  $n$  es el Índice Power Law.

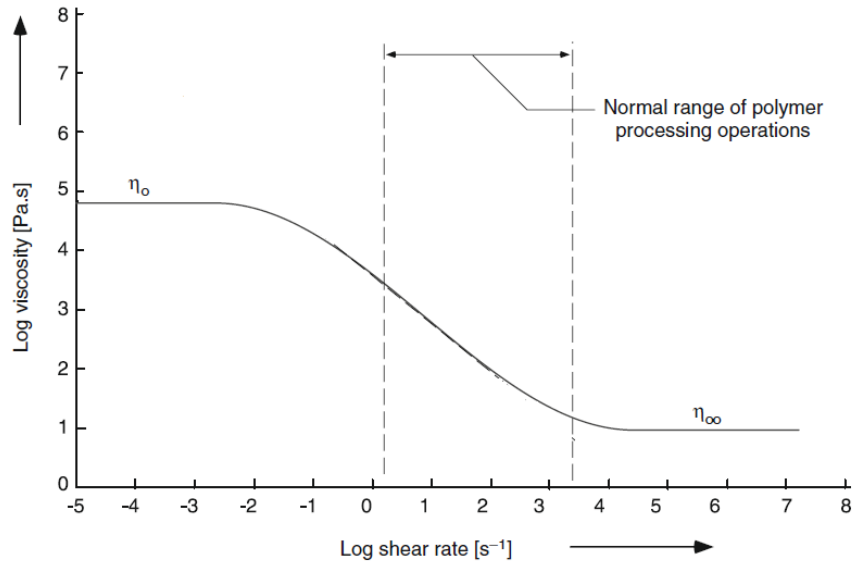


Figura 3. Comportamiento típico de un fluido Pseudoplástico típico. Tomado y modificado de (Rauwendaal, 2014).

El Modelo Cross-Power Law, considera los efectos de la rata de corte y de la temperatura sobre la viscosidad, describiendo tanto el comportamiento Newtoniano, como el corte adelgazante (Shear Thinning), es modelado por la ecuación general de Cross (Morrison, 2001) (Osswald et al., 2015).

$$\frac{\eta\dot{\gamma}-\eta_{\infty}}{\eta_0-\eta_{\infty}} = \frac{1}{1+(K\dot{\gamma})^{1-n}} \quad (2.14)$$

Donde  $\eta_0$  es la viscosidad en la rata de corte cero,  $\eta_{\infty}$  es la viscosidad en la rata de corte infinita,  $K$  es una constante de tiempo y  $n$  índice Power Law. Cuando  $\eta\dot{\gamma} \ll \eta_0$  y  $\eta\dot{\gamma} \gg \eta_{\infty}$ , el modelo se reduce al Modelo Power Law (Ley de Potencia) (Macosko, 1994) (Han, 2007).

Modelo de Bird-Carreau-Yasuda, describe los medios para predecir las propiedades viscoelásticas en estado estable y dinámico, de dispersiones concentradas y diluidas, en un amplio rango de velocidades de corte en estado estable y dinámico oscilatorio (Dus et al., 1990). Para ello toma en cuenta la meseta plana Newtoniana, ajustando un amplio rango de rata de deformación. La ecuación que lo representa esta dada por:

$$\frac{\eta\dot{\gamma}-\eta_{\infty}}{\eta_0-\eta_{\infty}} = (1 + |\lambda\dot{\gamma}|^a)^{\frac{(n-1)}{a}} \quad (2.15)$$

Donde  $\eta_0$  es la viscosidad en la rata de corte cero,  $\eta_{\infty}$  es la viscosidad en la rata de corte infinita en el segundo meseta Newtoniana,  $\lambda$  es una constante de tiempo y  $n$  índice Power Law (que se toma en cuenta para el comportamiento de corte

adelgazante) y el parámetro  $a$ , que toma en cuenta el ancho de la región de transición entre la viscosidad cero y la región de que modela la Ley de Potencia (Power Law) (Chen, 1972) (Bird, 1976) (Dus et al., 1990) (Rauwendaal, 2014) (Osswald et al., 2015).

Modelo de Herschel-Bulkley, es ampliamente usado para representar el comportamiento de fluidos que tiene esfuerzos iniciales (distintos de cero), tal como los fluidos de Bingham, pero que de otra manera muestran un comportamiento de corte adelgazante. El modelo es representado por las ecuaciones:

$$\tau = \tau_0 + m\dot{\gamma}^n \quad (2.16)$$

$$\eta = \frac{\tau_0}{\dot{\gamma}} + m\dot{\gamma}^{n-1} \quad (2.17)$$

Para  $\tau > \tau_0$ . Donde  $\tau_0$  es el esfuerzo de inicio,  $m$  es el índice de consistencia y  $n$  es el Índice Power Law. Tal cual el Modelo de Bingham, este modelo requiere un nivel crítico de esfuerzo para iniciar el flujo. De manera similar al Modelo Power Law  $n < 1$  representa el corte adelgazante,  $n > 1$  representa al corte espesante y  $n = 1$ , el modelo se reduce al Modelo de Bingham y representa el flujo Newtoniano con un valor crítico de esfuerzo de inicio (Mitsoulis et al., 1993) (Alexandrou et al., 2000), (Rao, 2014) y (Osswald et al., 2015).

### 2.1.3 Modelos analíticos y numéricos para la extrusión de polímeros

Según Vinicius et al., (2014), en el procesamiento de polímeros, la calidad final del producto depende en gran parte de las características y propiedades fundido, cantidad de flujo y mezclado de este; es por estas razones que la optimización del proceso, es totalmente necesaria. Sin embargo, durante mucho tiempo se ha recurrido a la construcción de equipos con materiales transparentes y a escala, que permitan la visualización del flujo del polímero durante el proceso, invirtiéndose mucho dinero y tiempo en este. Además, predecir particularmente el comportamiento de mezclas, se hace extremadamente difíciles. Todo lo anterior ha llevado, a utilizar modelos analíticos y simulación numérica, como alternativa para la optimización y análisis del proceso de extrusión (Covas, 1995) (Utracki et al., 2002) (Rauwendaal, 2014), (Osswald et al., 2015).

En general, los modelos analíticos que se utilizan en este trabajo, están basados en la Teoría Hidrodinámica de las extrusoras de tornillo, (ver sección 1.3). Estos modelos, suponen que: (1) el flujo es laminar, (2) el flujo es isotérmico, (3) el fluido es Newtoniano e incompresible, (4) las fuerzas gravitacionales son despreciadas,

(5) el flujo es totalmente desarrollado y (6) no hay deslizamiento en las paredes (Alves et al., 2009), (Li et al., 1995).y (Tadmor et al., 2006), moviéndose en una extrusora de tornillo único con canal finito, logrando la simplificación del problema, al punto que el tornillo de extrusión, sea desenrollado (figura 4) y pase a ser un canal rectangular, cubierto por una placa plana infinita (el barril) como se observa en la figura 5., el cual es movido a velocidad constante  $V_b$  con un ángulo ( $\theta_b$ ) en dirección  $z$ . (Rowell et al., 1922, 1928).

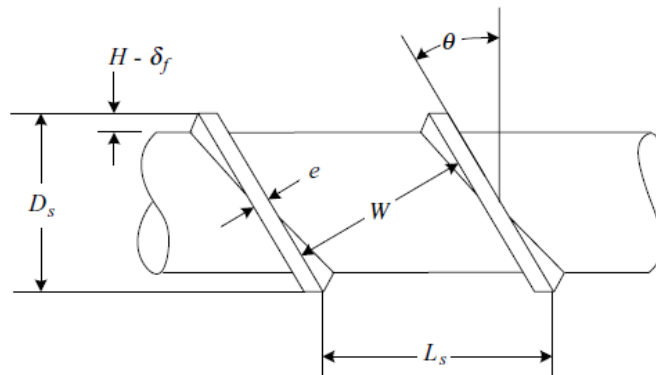


Figura 4. Geometría de un tornillo de extrusora. Tomado de Tadmor (2006).

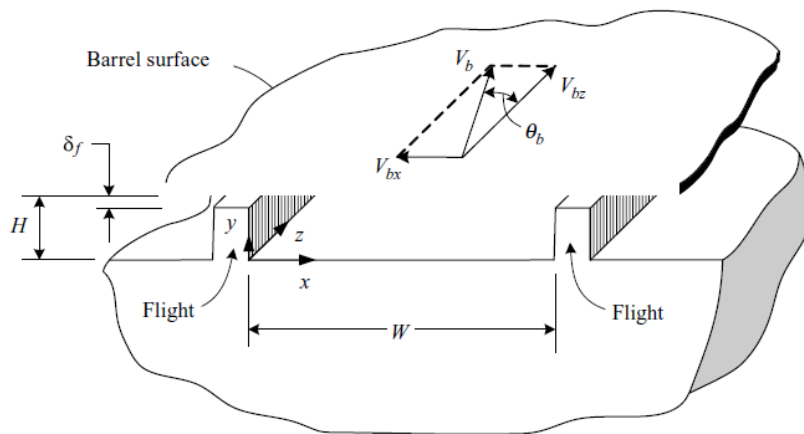


Figura 5. Geometría del canal rectangular del tornillo desenrollado. Tomado de Tadmor (2006).

Para resolver este problema, se tienen en cuenta los supuestos que: el flujo y perfil de velocidad, están totalmente desarrollados. Teniendo en cuenta lo anterior, se plantea la Ecuación de Movimiento en coordenadas rectangulares ( $x, y, z$ ):



$$\rho \left( V_x \frac{\delta V_x}{\delta x} + V_y \frac{\delta V_x}{\delta y} \right) = -\frac{\delta P}{\delta x} + \mu \left( \frac{\delta^2 V_x}{\delta x^2} + \frac{\delta^2 V_x}{\delta y^2} \right) \quad (2.18 \text{ a})$$

$$\rho \left( V_x \frac{\delta V_y}{\delta x} + V_y \frac{\delta V_y}{\delta y} \right) = -\frac{\delta P}{\delta y} + \mu \left( \frac{\delta^2 V_y}{\delta x^2} + \frac{\delta^2 V_y}{\delta y^2} \right) \quad (2.18 \text{ b})$$

$$\rho \left( V_x \frac{\delta V_z}{\delta x} + V_y \frac{\delta V_z}{\delta y} \right) = -\frac{\delta P}{\delta z} + \mu \left( \frac{\delta^2 V_z}{\delta x^2} + \frac{\delta^2 V_z}{\delta y^2} \right) \quad (2.18 \text{ c})$$

Donde  $\rho$  es la densidad del fundido.

Al tener en cuenta las suposiciones listadas anteriormente ( $\delta v_y/\delta x \approx 0$ ,  $\delta v_x/\delta x \approx 0$  y  $\delta v_y/\delta y \approx 0$ ), se obtiene la ecuación diferencial (2.19), para la cual se planean soluciones basadas en distintas condiciones de contorno, propuestas por cada autor en particular, como se verá en la siguiente sección.

$$\frac{\delta P}{\delta z} = \mu \left( \frac{\delta^2 V_z}{\delta x^2} + \frac{\delta^2 V_z}{\delta y^2} \right) \quad (2.19)$$

### 2.1.3.1 Modelo matemático estándar para extrusión de fluidos newtonianos isotérmicos “Modelo de Tadmor”.

En este modelo, en la dirección hacia abajo del canal el perfil de velocidad es obtenido por la solución de la ecuación diferencial parcial (2.19). Esto muestra que el gradiente de presión  $\delta P/\delta z$  es una constante. Las condiciones de contorno, para las cuales se soluciona la ecuación (2.19), son:

$$\text{Base del tornillo} \quad V_z(x, 0) = 0 \quad (2.20a)$$

$$\text{Barril} \quad V_z(x, H) = V_{bz} \quad (2.20b)$$

$$\text{Aletas del tornillo} \quad V_z(0, y) = 0 \quad (2.20c)$$

$$V_z(W, y) = 0 \quad (2.20d)$$

Según las condiciones de contorno propuestas, este modelo, considera que el barril de la extrusora tiene movimiento (ecuación 2.20b), mientras que el tornillo y las aletas permanecen fijas (ecuación 2.20a y 2.20c-2.20 d, respectivamente), lo cual es planteado en la Teoría Hidrodinámica de las extrusoras de tornillo, propuesta por Rowell et al., (1922, 1928). Además, este modelo maneja relaciones

profundidad/ancho del tornillo ( $H/W$ )  $>1$ . El desarrollo matemático para este modelo, está planteado en el Anexo 1.

La solución para la velocidad hacia dentro del canal del tornillo en la dirección  $z$  por separación de variables está dada por:

$$u_z = \frac{4}{\pi} \sum_{i=1,3,5}^{\infty} \frac{\sinh(i\pi h\xi)}{i \sinh(i\pi h)} \sinh(i\pi \chi) - \left( \frac{H^2}{2\mu V_{bz}} \frac{\partial P}{\partial x} \right) \cdot \left[ \xi^2 - \xi + \frac{8}{\pi^3} \sum_{i=1,3,5}^{\infty} \frac{\cosh[i\pi(\chi-0,5/h)]}{i^3 \cosh(i\pi/2h)} \sin(i\pi \xi) \right] \quad (2.21)$$

Donde  $u_z = V_z/V_{bz}$ ,  $\chi = x/W$  y  $h = H/W$

Ahora bien, la rata de flujo ( $Q_z$ ), hacia abajo del canal, estado por la ecuación (2.2.2):

$$Q_z = WHV_{bz} \iint u_z d\xi d\chi \quad (2.22)$$

Integrando la ecuación (2.22), se obtiene:

$$Q = \frac{V_{bz}WH}{2} F_d + \frac{WH^3}{12\mu} \left( -\frac{\delta P}{\delta z} \right) F_d \quad (2.23)$$

Donde  $F_d$  (factor de forma para el flujo de arrastre) y  $F_p$  son (factores de forma para la presión de flujo). Ellos toman valores que son más pequeños que 1, representando el efecto reducido de las aletas sobre la rata de flujo ( $Q_z$ ), entre placas paralelas infinitas.

### 2.1.3.2 Modelo Analítico de Li - Hsieh

La modificación presentada por Li-Hsieh, a la Teoría Hidrodinámica de las extrusoras de tornillo, propuesta por Rowell et al., (1922, 1928)., es el tornillo rotatorio y barril estacionario, lo que es usual para extrusoras reales (Li et al., 1996). Este modelo, plantea la solución de la ecuación (2.19) para el flujo hacia abajo del canal (dirección  $z$ ), teniendo en cuenta las condiciones de contorno, propuestas en las ecuaciones (2.24a – 2.24d) y para relaciones de profundidad/ancho del tornillo pequeñas, es decir ( $H/W$ )  $<1$ . Cabe resaltar que el desarrollo matemático completo para este modelo se presenta en el Anexo 1.

$$\text{Barril:} \quad v_z(x, H) = 0 \quad (2.24a)$$

$$\text{Base del tornillo:} \quad v_z(x, 0) = R_s \omega \cos \phi_b \quad (2.24b)$$

$$\text{Aletas del tornillo:} \quad v_z(0, y) = (R_b + y) \omega \cos \phi_b \quad (2.24c)$$

$$v_z(W, y) = (R_b + y) \omega \cos \phi_b . \quad (2.24d)$$

Así, diferente del modelo convencional de placas paralelas, el canal del tornillo en este nuevo modelo, es mantenido en movimiento con velocidad real y la superficie del barril, es estacionaria. Este grupo de condiciones de contorno son definidas, basadas en las velocidades absolutas del tornillo rotando. El perfil de velocidad basado en este grupo de condiciones de contorno puede ser integrado directamente para obtener la nueva rata de flujo volumétrico neto (Li et al., 1995, 1996).

Se observa que las velocidades de las aletas del tornillo no son cero, pero son una función de velocidad del canal. En soluciones existentes Rowell y Finlayson (1922, 1928), Tadmor et al., (1979), Rauwendaal (1986), las velocidades de las aletas del tornillo son cero, por asumir que el tornillo esta estacionario. Así el tornillo es rotatorio, y las velocidades desde el centro del tornillo a la punta no son constantes para una función del radio.

El método de transformación sinusoidal finito, puede ser usado para transformar el problema dentro de ecuaciones diferenciales parciales y resolver  $v_z(x, y)$ . El desarrollo de la ecuación (2.19) la presenta Li et al., (1995), y la solución final para la velocidad de flujo hacia dentro del canal, está dada por:

$$v_z = R_s \omega \cos \phi_b f_{V1} + (2R_b - H) \omega \cos \phi_b f_{V2} + \frac{1}{\mu} \frac{\delta P}{\delta z} \cdot (aW^2 f_{V3} + bH^2 f_{V4}) \quad (2.25)$$

Donde, a y b son constantes dependientes de la relación  $H/W$ . Cuando la relación  $H/W$  es pequeña  $a=0$  y  $b=1$ , cuando la relación  $H/W$  es grande,  $a=1$  y  $b=0$ .  $R_b$ :

Para el diseño de extrusora y la simulación del proceso de extrusión, la relación entre la rata de flujo y la presión es de gran interés. Por integración de la velocidad hacia abajo del canal,  $v_x(x, y)$  (ecuación 2.25) arriba del área de sección transversal del canal, la rata de flujo ( $Q_z$ ), general puede ser obtenido por:

$$Q_z = R_s \omega \cos \phi_b W^2 f_{Q1} + (2R_b - H) \omega \cos \phi_b H^2 f_{Q2} + \frac{a}{\mu} \frac{\delta P}{\delta z} \left( W^4 f_{Q3} - \frac{W^3 H}{12} \right) + \frac{b}{\mu} \frac{\delta P}{\delta z} \left( H^4 f_{Q4} - \frac{H^3 H}{12} \right) \quad (2.26)$$

Donde,  $f_{Q1}, f_{Q2}, f_{Q3}, f_{Q4}$  son coeficientes de la ecuación (2.26).

### 2.1.3.3 Modelo Analítico de Alves

Este modelo toma las mismas consideraciones que el modelo de Li-Hsieh, para ser implementado, solo que el rango en que trabaja la relación  $H/W < 1$ , es decir para bajas e intermedias. Además, la técnica de solución matemática que este utiliza es TECNICA DE TRANSFORMADA INTEGRAL GENERALIZADA (GITT). En Vinicius et al., (2009), se presenta de manera detallada esta técnica.

### 2.1.4 Modelado analítico y numérico del fenómeno de “die-swell”

El fenómeno de “*Die Swell*” (B), es común en la extrusión de polímeros. Este término es empleado para expresar el incremento en la sección transversal del extruido a la salida del dado (relación del diámetro del extruido (D)/diámetro del canal del dado (d)) (Anand et al., 1980) (Henderson et al., 1986) (Sirisinha, 1997) (Wang, 2012), como se observa en la figura 6.

Tanner (1970), en la Teoría de Recogimiento Elástico, presenta un modelo (para un flujo de Poiseuille y algunos polímeros fundidos), donde se tiene en cuenta los siguientes supuestos: (a) el flujo es isotérmico e incompresible; (b) el dado es muy largo ( $longitud/diámetro \rightarrow \infty$ ); (c) los efectos inerciales del flujo podrían ser ignorados; (d) la gravedad, fuerzas de cuerpo, de tensión de superficies, son ignorados, la barra extruida es libre de carga; (e) el pequeño y lento recogimiento lejos del dado es ignorado. Los supuestos (a)-(d), parecen ser realistas para aplicación en la extrusión de polímeros fundidos y soluciones poliméricas altamente viscosas. El supuesto (e) está en concordancia con todas las observaciones experimentales hechas anteriormente por otros autores precedentes a Tanner (1970), como ya se explicó en la sección (1.3).

El fenómeno de “die-swell”, está relacionado con muchas variables, entre ellas: temperatura, presión, cantidad y tipo de flujo, tasa de corte, esfuerzos de corte en las paredes del dado, geometría y dimensiones del dado, características moleculares del polímero, entre otras (Brandao et al., 1996), (Henderson et al., 1986), (Liang et al., 2001), (Sirisinha, 1997), las cuales al ser combinadas y/o variadas en su rango de operación, proporcionan resultados que permiten entender que comportamiento del polímero, está sujeto tanto a las propiedades del material, como a la condiciones de operación al que sea sometido. En este trabajo específicamente se estudiará la relación entre los esfuerzos de corte en las paredes del dado y el “die-swell”.

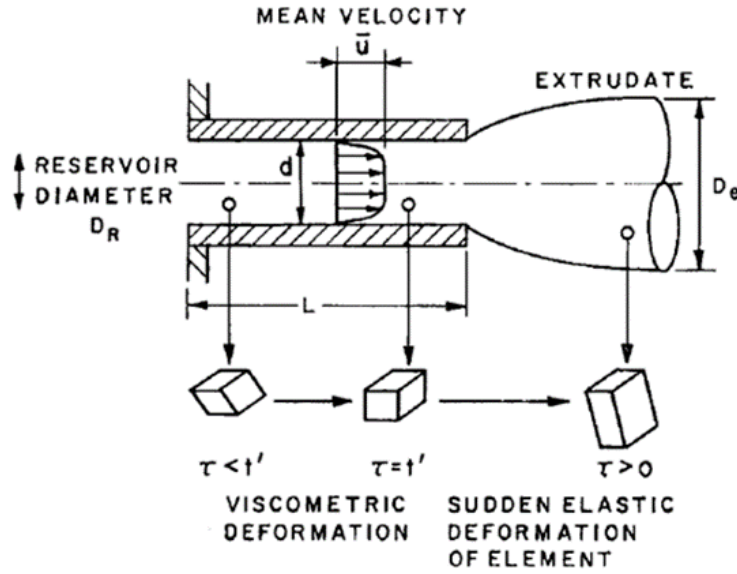


Figura 6. Bosquejo de un extruido expandido, mostrando un recogimiento elástico. Tomado de Tanner (1970).

#### 2.1.4.1 Modelo matemático de Brandao-Spieth-Lekakou

A pesar de los muchos modelos para el estudio del *Die Swell*, la mayoría son basados en la Teoría de Recogimiento Elástico, de Tanner. (Anand et al., 1980), (Liang, 2001, 2008), (Song et al., 2006), entre otros. Para el caso de este trabajo se ha seleccionado el Modelo Matemático Brandao–Spieth-Lekakou, cuya ecuación constitutiva se presenta como:

$$B = \left[ 1 + \frac{(a_2 - a_1)A_2^2}{4a_1a_2} \frac{\tau_{wc}}{\tau_w} \tau_w^{2a_2-2} + \frac{A_2^2}{4a_2} \tau_w^{2a_2-2} \right]^{1/6} + 0.12 \quad (2.27)$$

donde, B: es el die-swell,  $\tau_w$ : esfuerzo de corte en la pared del canal,  $\tau_{wc}$ : esfuerzo crítico de corte en la pared del canal,  $a_1, a_2, A_1$  y  $A_2$  son constantes características empíricas del material.

Este modelo considera parámetros reológicos, como la rata de corte, índice de flujo y la viscosidad, los cuales se obtienen de un análisis reológico convencional. Además que incluye contribuciones elásticas y newtonianas (Brandao et al., 1996). Sin embargo, este modelo hace buenas predicciones de die-swell, para esfuerzos de corte bajos, aunque no se considere esfuerzo crítico de corte en la pared del canal ( $\tau_{wc}$ ), pero al considerar este como en la ecuación (2.27), se pueden hacer buenas predicciones para esfuerzos de corte altos.

La expansión predicha del polímero a la salida del dado posee dos componentes, como se muestran en las ecuaciones (2.28 y 2.29):

$$B = B_{Elastica} + B_{Newtoniano} \quad (2.28)$$

$$B = \frac{D}{d} \quad (2.29)$$

Donde  $B_{Newtoniano} = 0.12$  por definición de constante (Brandao et al., 1996). Para  $B_{Elastica}$ , se deriva la de la Teoría de Recogimiento elástico de Tanner:

$$B_{Elastica} = \left[ 1 - \frac{A^2 (4-a)}{4 (2+a)} \tau_w^{2a-2} \right]^{1/6} \quad (2.30)$$

Las constantes de ajuste aparecen del modelo de tipo de Ley de Potencia.

$$N_1 = \tau_{11} - \tau_{22} = A\tau_{12}^a \quad (2.31)$$

Dónde:  $d$ : Diámetro del dado,  $D$ : Diámetro del extruido,  $N_1$ : Diferencia entre los dos primeros esfuerzos principales en el fluido,  $\tau$ : Esfuerzo de corte en el fluido y  $\tau_w$ : Esfuerzo cortante en la pared del dado

El ajuste de parámetros se hace graficando los valores de Diferencia entre los dos primeros esfuerzos principales en el fluido ( $N_1$ ) Vs Esfuerzo de corte en el fluido ( $\tau$ ). Luego se implementan en el modelo reológico de Ley de Potencia, para calcular las constantes empíricas  $A$  y  $a$ . Los valores obtenidos se reemplazan en la ecuación constitutiva (2.27), sin embargo allí aún se debe calcular el valor de  $\tau_w$ .

Para obtener el valor de  $\tau_w$ , se recurre a:

$$\tau_w = \frac{\Delta P D}{4L} \quad (2.32)$$

$$\Delta P = 2f \left( \frac{L}{D} \right) (\rho V^2) \quad (2.33)$$

$$f = \frac{16}{Re} \quad (2.34)$$

Dónde:  $\Delta P$ : Gradiente de presión,  $V$ : Velocidad del fluido,  $f$ : Factor proporcional y  $Re$ : Numero de Reynolds.

Y se procede a interpolar la curva  $N_1$  Vs  $\tau_w$ , para luego tomar los valores obtenidos y reemplazarlos en la ecuación constitutiva (2.27), y así obtener  $B$ .

#### 2.1.4.2 Modelo computacional viscoelástico

En este trabajo, se utiliza Computacional Fluid Dynamic (CFD), para el modelado numérico del fenómeno de “die-swell”. En las ecuaciones siguientes ecuaciones presentan el comportamiento de un fluido viscoelástico y la ecuación constitutiva, que será resuelta por el Método de Volúmenes Finitos. Las ecuaciones de

transporte que gobiernan el flujo de fluidos y la transferencia de calor, se definen mediante la integración sobre un volumen de control, considerando, la difusión pura en estado de flujo estable (Versteeg et al., 2007)

Las ecuaciones que gobiernan un flujo laminar, isotérmico e incompresible de un fluido viscoelástico, son las ecuaciones de continuidad, conservación de masa (2.35) y de momento (2.36) (Favero et al., 2010) (Holmes et al., 2012) (Mu et al., 2012):

$$\nabla \cdot (\mathbf{u}) = 0 \quad (2.35)$$

$$\frac{\delta(\rho \mathbf{u})}{\delta t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u} \mathbf{u}) = -\nabla p + \nabla \cdot \tau_s + \nabla \cdot \tau_p + \rho \mathbf{g} \quad (2.36)$$

Junto con la ecuación mecánica constitutiva para describir la relación entre el esfuerzo y la rata de deformación para el fluido de interés. En las ecuaciones de arriba,  $\rho$ : densidad,  $\mathbf{u}$ : vector velocidad,  $p$ : presión,  $\mathbf{g}$ : aceleración por la gravedad,  $\tau_s$ : tensor de esfuerzo del solvente y  $\tau_p$ : tensor de esfuerzo del polímero.

La contribución del solvente  $\tau_s$ , está dada por:

$$\tau_s = 2\eta_s \mathbf{D} \quad (2.37)$$

Donde,  $\eta_s$ : viscosidad del solvente y  $\mathbf{D}$ : es la rata de deformación del tensor:

$$\mathbf{D} = \frac{1}{2}(\nabla \mathbf{u} + [\nabla \mathbf{u}]^T) \quad (2.38)$$

La contribución elástica, correspondiente a la parte del polímero, es obtenida desde la solución de una ecuación diferencial constitutiva. Varias ecuaciones constitutivas para fluidos viscoelástico, son halladas en la literatura, como por ejemplo Maxwell, Oldroyd-B, Phan-Thien-Tanner (PTT), Giesekus entre otras (Giesekus, 1982), (Cherizol et al., 2015). En este caso se usará en la ecuación constitutiva del Modelo de Lineal de Maxwell (2.39) (Bird et al., 1987), (Favero, 2009), que es ampliamente conocida, puesto que Maxwell, incorpora el efecto de memoria de los materiales. A pesar de que esta ecuación constitutiva considera la viscosidad constante en un amplio rango de rata de corte, lo cual lo hace poco recomendable para este tipo de materiales (Cherizol et al., 2105). Sin embargo, se implementa este modelo, porque los parámetros requeridos son fácilmente calculables, a partir de valores reológicos obtenidos por simulación, sin necesidad de hacer obligatoriamente ensayos experimentales para calcularlos.

$$\tau_{pk} + \lambda_k \frac{\delta \tau_{pk}}{\delta t} = 2\eta_{pk} \mathbf{D} \quad (2.39)$$

Donde,  $\lambda_k$ : tiempo de relajación y  $\eta_{pk}$ : coeficiente de viscosidad en la rata de corte cero.



## Capítulo 3.

### 3. Métodos

La metodología implementada para el desarrollo de este trabajo, está basada solo en el uso de la simulación para la obtención de datos sobre el comportamiento de las mezclas de Almidón de Yuca/Poli (Ácido Láctico) (TPS/PLA) y sus materiales constituyentes en el proceso de extrusión. Teniendo en cuenta lo anterior, se divide el proceso en 3 etapas como se muestra en la figura 7, siguiendo el sentido hacia adelante.



Figura 7. Proceso para estudio del comportamiento de las mezclas TPS/PLA y materiales constituyente, durante el proceso de extrusión.

Sobre la metodología propuesta para este trabajo no hay antecedentes referenciados en la literatura, puesto que, hasta el momento, la caracterización para materiales blandos (polímeros tradicionales, biodegradables y sus mezclas) se ha hecho mediante ensayos experimentales en equipos para reometría capilar, viscosímetros, reómetros (de flujos de corte, cono, placas, etc.), Análisis Dinámico Mecánico (DMA). Aunque la Caracterización Reológica basada en Dinámica Molecular y los modelos analíticos y numéricos para estudio del comportamiento del material durante el paso por el tornillo de la extrusora y el fenómeno de “die-swell” ya se han utilizado, estos solo han sido para estudiar polímeros tradicionales provenientes del Petróleo y las mezclas entre ellos.

Se propone entonces una metodología que combine la Caracterización Reológica basada en Dinámica Molecular, con modelos matemáticos y numéricos que permitan predecir el comportamiento de los materiales en estudio, cuando estos son procesados mediante extrusión, con el fin de obtener información sobre el material en proceso, condiciones de operación, equipo adecuado y posible aplicación del material obtenido, como se muestra en la figura 8. Así mismo, para cada etapa del proceso se presenta una metodología específica de trabajo, como se presenta en las figuras 8 al 10.

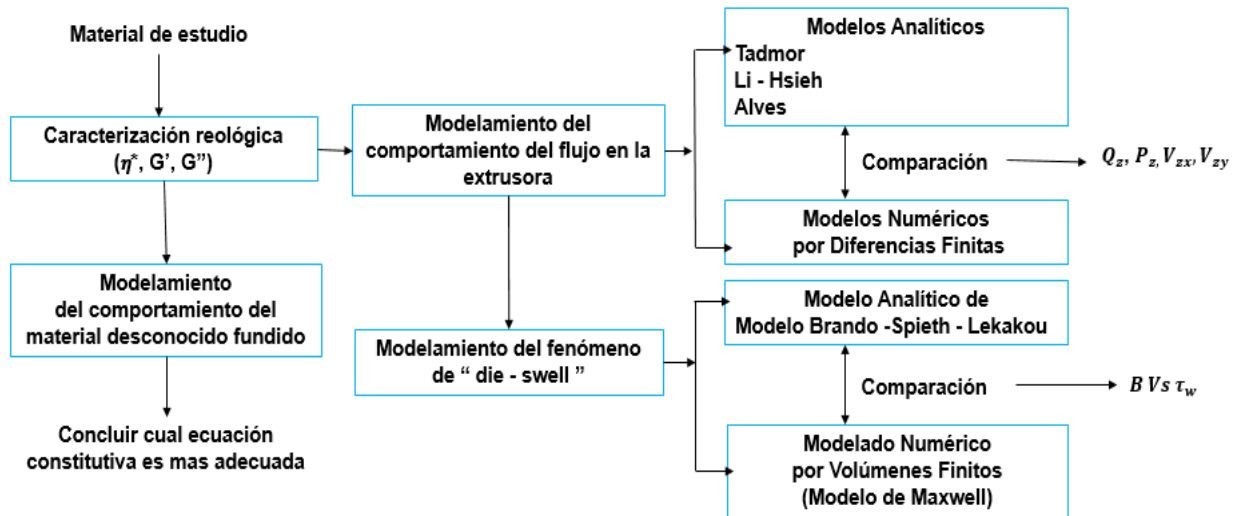


Figura 8. Metodología general para el estudio mezclas TPS/PLA y sus materiales constituyentes.

Cabe resaltar que tanto el software OCTA<sup>®</sup> como los modelos utilizados para estudio del comportamiento del flujo, trabajan en tasas de deformación bajas. Además, el software OCTA<sup>®</sup>, tiene una biblioteca con características y propiedades de polímeros tradicionales provenientes del Petróleo, pero no contiene información alguna sobre polímeros biodegradables. De otro lado para la medición del parámetro MaxStretchRadio, no se reporta una ecuación que permita calcularlo analíticamente para una mezcla.

Los modelos analíticos para el modelamiento de flujo en la extrusora están planteados para polímeros tradicionales provenientes del Petróleo, son válidos para en cierto rango de valores, como ya se mencionó en el capítulo 2. Sin embargo, aquí se recuerdan las restricciones de estos modelos:

-Modelo de Tadmor: el barril de la extrusora se encuentra en movimiento, mientras el tornillo y sus aletas están fijas. Estudia la relación profundidad/ancho ( $H/W$ ), para valores mayores a 1.

-Modelo de Li-Hsieh: el barril de la extrusora está fijo, mientras el tornillo como sus aletas tienen movimiento. Estudia la relación profundidad/ancho ( $H/W$ ), para valores menores a 1.

-Modelo de Alves: el barril de la extrusora está fijo, mientras el tornillo como sus aletas tienen movimiento. Estudia la relación profundidad/ancho ( $H/W$ ), para valores bajos e intermedios menores que 1.

El software ViscoelasticFluidFOAM, en cual se simula el “die-swell” utilizando el modelo de Maxwell, se ha probado con polímeros tradicionales con baja densidad (menos de 1000 Kg/m<sup>3</sup>) y viscosidad, y comporta miento de flujo laminar.

### 3.1.1 Materiales e insumos

Las materias primas empleadas para la preparación de mezclas TPS/PLA, son Almidón de Yuca, Poli (ácido láctico) y glicerina. Los valores de las propiedades y características de estos materiales, se obtuvieron por datos reportados en la literatura por Dorlan et al., (2000), Gu et al., (2008), Huan et al., (1980), Huneault et al., (2007) y Wasserman et al., (1996), tal como se muestra en la tabla 1., dado que en este trabajo no se utilizó la experimentación, las mezclas no pudieron ser preparadas físicamente. Los datos utilizados para el Polietileno de Baja Densidad (LDPE) y el Poliestireno Cristal (PS), se obtuvieron de la biblioteca del software OCTA® PoymerData.udf PASTA y se presentan en la tabla 2.

Los softwares OCTA® (versión académica libre), OpenFOAM, Jupyter (lenguaje Phytion) y, utilizados para las simulaciones y solución de ecuaciones, son de uso libre. Para el caso del software ViscoelasticFluidFOAM, fue donado para este trabajo únicamente, por Favero et. al, (2009), puesto que este hace parte de sus trabajos de investigación.

**Tabla 1. Valores de materiales constituyentes de las mezclas GTPS/PLA**

<b>PARAMETROS</b>	<b>Amilosa</b>	<b>Amilopectina</b>	<b>PLA</b>
(% de componente/100)	0,17	0,83	1,00
n (mol)	1,00	1,00	1,00
M0 (g/mol)	178	323	59
Mw (g/mol)	258000	1028000	204453
Me (g/mol)		115000	8700
ρ (g/cm3)			1,24
Z		9	24
R (dina*cm/mol*K)	83140000	83140000	83140000
T (K)			
Gn (Mpa)			0,5
p (índice de polidispersidad)	4,6	1,3	2,5

Tomados de Dorlan et al., (2000), Gu et al., (2008), Huneault et al., (2007) y Wasserman et al., (1996).

**Tabla 2. Parámetros de entrada para simulación por PASTA**

Parámetros de entrada		
Name	LDPE	PS
$M_0$	28.0 g/mol	104.0 g/mol
$M_e$	1128.0 g/mol	14400 g/mol
$GN_0$	2.1	0,2
Temperature	463.15 K	463.15 K
MaxStretchRadio	4.4	4.3
ChainType	arm	Lineal
Mw	300000 g/mol	4000000 g/mol
Mw/Mn	2.5	2.0
DistrubutionFuntion	Discrete	Discrete
Type of Fraction	Weigh Fraction	Weigh Fraction
N° de cadenas	1000	1000
FlowType	No Flow	No Flow
Strain	0.0	0.0
StrainRate	0.0	0.0
dt	1	1
MaxTimeStep	10000	10000
IntervalStep	1	1

Tomado de PoymerData.udf PASTA

### 3.1.2 Caracterización Reológica

La caracterización reológica de los materiales en estudio, se hace según el esquema mostrado en la figura 9.

Las simulaciones se realizaron en un computador portátil marca Hewlett-Packard (HP®), modelo Pavilion g4-2050la Notebook PC, con procesador Intel Core i3-2350M, 6GB RAM, 640GB HDD, WLAN & Bluetooth.

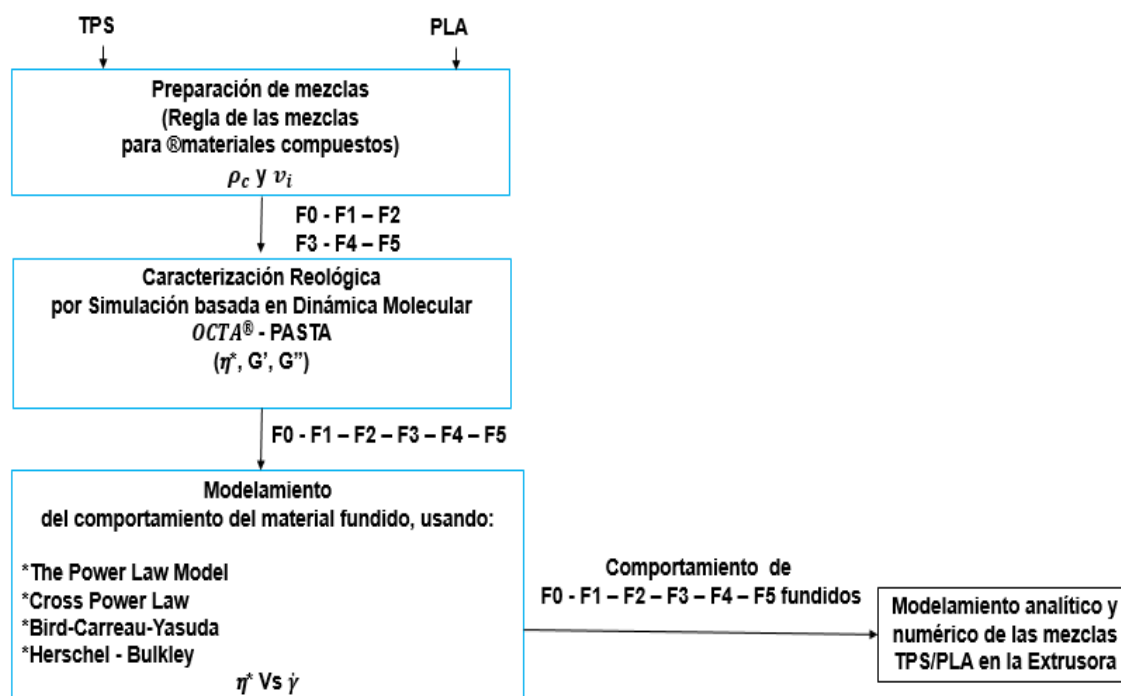


Figura 9. Esquema para caracterización reológica y comportamiento de los materiales fundidos.

### 3.1.2.1 Preparación de mezclas TPS/PLA

Para definir las formulaciones a evaluar en este trabajo, se toman como referencia los trabajos de Gu et al. (2008), Hamad et al (2010, 2011), Huneault et al. (2008), y Wu et al. (2008), quienes varían los porcentajes de TPS y PLA, obteniendo 4 tipos mezclas con diferentes formulaciones, sin que ninguna de las anteriores, sea igual a las formulaciones propuestas en el presente trabajo, tal como se muestra en la tabla 3. Las formulaciones propuestas y los materiales constituyentes (en porcentaje peso/peso), se presentan en la tabla 4. Las formulaciones F0, F1, F2, F3 y F4 están compuestas de TPS, el cual es una mezcla de Almidón de Yuca y Glicerina (como lubricante). Vale aclarar que la variación del porcentaje (%) de Glicerina no es relevante en este trabajo, pues este solo sirve como lubricante y aglutinante.

**Tabla 3. Formulaciones de mezclas TPS/PLA**

<b>Formulación</b>	<b>Contenido (% p/p)</b>					
	<b>F0</b>	<b>F1</b>	<b>F2</b>	<b>F3</b>	<b>F4</b>	<b>F5</b>
TPS	100	80	60	40	20	0
PLA seco	0	20	40	60	80	100
<b>Nomenclatura</b>	<b>TPS</b>	<b>80/20</b>	<b>60/40</b>	<b>40/60</b>	<b>20/80</b>	<b>PLA</b>

Para el cálculo de las propiedades de las mezclas TPS/PLA, se utiliza la Regla de las Mezclas para Materiales Compuestos. Esta consiste en hallar la densidad total del compuesto, usando la relación de las fracciones másicas o volumétricas de los materiales constituyentes. La Regla de las Mezclas, es representada por la ecuación (2.10),

$$\rho_c = \sum_{i=1}^n \rho_i v_i \quad (3.1)$$

Donde,  $\rho_c$ : es la densidad del compuesto,  $\rho_i$ : densidad de los  $i$  materiales constituyentes y  $v_i$ : fracción volumétrica de los  $i$  materiales constituyentes.

$$\sum_{i=1}^n v_i = 1 \quad (3.2)$$

Dónde,  $v_i = V_i/V_c$  = Fracción de volumen de los  $i$  constituyentes,  $V_i$  = Volumen del componente  $i$  y  $V_c$  = Volumen total del compuesto.

### 3.1.2.2 Caracterización basada en Dinámica Molecular

Para la caracterización se utiliza el Modulo PASTA (Polymer Rheology Analyzer with Slip – Link Model of Entanglement). PASTA es un código de simulación reológica, que ha sido desarrollado debido a la dinámica y reológica de los polímeros (Masubuchi, 2016), está basado en el Modelo Slip-Link (Modelo de enlace deslizante) de Doi-Takimoto (Doi et al., 2003) (Masubuchi, 2016), de los polímeros enredados, donde un conjunto de cadenas reptantes es considerado (Masubuchi, 2016), cuya fundamentación reológica y matemática, se explicó en el capítulo 2. La tabla 4, contiene los parámetros de entrada necesarios para la simulación mediante este software.

**Tabla 4. Parámetros de entrada para simulación por PASTA**

<b>Parámetros PASTA</b>
Name
$M_0$
$M_e$
$GN_0$
Temperature
MaxStretchRadio
ChainType
$M_w$
$M_w/M_n$
DistrubutionFuntion
Type of Fraction
WeighFraction
N° de cadenas
FlowType
Strain
StrainRate
dt
MaxTimeStep
IntervalStep

Tomado de PoymerData.udf PASTA.

### **3.1.3 Estudio del comportamiento del material en la extrusora**

Los Modelos de Tadmor, Li-Hsieh y Alves (Modelos Analíticos) y el Modelo Numérico basado en Diferencias Finitas, permiten estudiar el comportamiento del material durante su paso por la extrusora, siendo procesado por el tornillo de esta. Los resultados obtenidos mediante la solución de estos, para variables como velocidad de tornillo, caudal y caída de presión dentro del canal, son comparados con los resultados hallados a través de los modelos analíticos.

Los datos de la geometría y características de operación de la extrusora utilizada, son tomados del trabajo de Arias (2010). El equipo utilizado es una extrusora con venteo C.W. Brabender – Tipo 2523 (N° 1417). En las tablas 5 y 6, se describen las características del equipo y las dimensiones del tornillo.

**Tabla 5. Datos de la Extrusora con venteo C.W. Brabender  
Tipo 2523 (N° 1417) de ¾ in.**

Voltaje	230 V
Corriente	16 A
Frecuencia	60 Hz

**Tabla 6. Geometría del tornillo (No. 05-00-043)**

Profundidad en el canal (H)	9,6 mm
Ancho del canal en radio interno (W)	54,9 mm
Radio interno del barril (R <sub>b</sub> )	19 mm
Ancho de la aleta (e)	11,9 mm
n <sub>t</sub>	1
Espacio entre las aletas del tornillo	0,000763 mm
Angulo de hélice (Θ o ϕ)	17,76° (0,31 rad)
Angulo de hélice en el radio R <sub>b</sub> (Θ <sub>b</sub> o ϕ <sub>b</sub> )	10° - 60° (0,174 rad – 1,05 rad)
Numero de aletas	25
Relación de compresión	3:1
Relación L/D	25:1
Diámetro interno del barril (D <sub>b</sub> )	63 mm
Radio en la raíz de tornillo (R <sub>s</sub> )	9,4 mm

\*Algunos de estos valores fueron calculados, según las ecuaciones presentadas en Li et al., (1995), Tadmor et al., (2006) y (Rauwendaal, 2014).

### 3.1.3.1 Modelo Numérico por Diferencias Finitas

En este caso se implementa una solución numérica de Diferencias Finitas para la sección del tornillo, teniendo en cuenta el Modelo de Li-Hsieh. El cálculo de los parámetros se muestra en la sección de anexos.

$$\frac{\delta P}{\delta z} = \mu \left( \frac{\delta^2 w_z}{\delta x^2} + \frac{\delta^2 w}{\partial y^2} \right) \quad (3.3)$$

$$\text{Barril} \quad w_z(x, H) = 0 \quad (3.3a)$$

$$\text{Base del tornillo} \quad w_z(x, 0) = R_s \omega \cos \phi_b \quad (3.3b)$$

$$\text{Aletas del tornillo:} \quad w_z(0, y) = (R_b + y) \omega \cos \phi_b \quad (3.3c)$$

$$w_z(W, y) = (R_b + y) \omega \cos \phi_b \quad (3.3d)$$

Se considera  $\frac{\delta P}{\delta z}$  como constante en el dominio (x,y).

Luego, el flujo volumétrico es calculado integrando directamente la velocidad:



$$Q = \int_0^H \int_0^W w(x, y) dx dy \quad (3.4)$$

Se realiza la Aproximación por Diferencias Finitas de la Ecuación Diferencial, para ello se utiliza un estencil de segundo orden de precisión:

$$w(x, y) = w(x_m, y_n) = w(mh_x, nh_y) = w_{m,n} \quad (3.5)$$

$$m = 0, \dots, N_x - 1 \quad (3.5.1)$$

$$n = 0, \dots, N_y - 1 \quad (3.5.2)$$

$$\frac{\delta^2 w}{\delta x^2} = \frac{w_{m-1,n} - 2w_{m,n} + w_{m+1,n}}{h_x^2} + O(h_x^2) \quad (3.5.3)$$

$$\frac{\delta^2 w}{\delta y^2} = \frac{w_{m,n-1} - 2w_{m,n} + w_{m,n+1}}{h_y^2} + O(h_y^2) \quad (3.5.4)$$

Aplicando a la ecuación diferencial:

$$\left( \frac{\delta^2 w_z}{\delta x^2} + \frac{\delta^2 w}{\delta y^2} \right) = \frac{1}{\mu} \frac{\delta P}{\delta z} \quad (3.5.5)$$

$$\frac{w_{m-1,n} - 2w_{m,n} + w_{m+1,n}}{h_x^2} + \frac{w_{m,n-1} - 2w_{m,n} + w_{m,n+1}}{h_y^2} = \frac{1}{\mu} \frac{\delta P}{\delta z} \quad (3.5.6a)$$

$$h_y^2 w_{m-1,n} + h_x^2 w_{m,n-1} - 2(h_x^2 + h_y^2) w_{m,n} + h_y^2 w_{m+1,n} + h_x^2 w_{m,n+1} = \frac{h_x^2 h_y^2}{\mu} \frac{\delta P}{\delta z} = k = \text{cte} \quad (3.5.6b)$$

Y las condiciones de contorno:

$$w_{mN_y-1} = 0 \quad (3.5.7)$$

$$w_{m,0} = R_s \Omega \cos \theta \quad (3.5.8)$$

$$w_{N_x-1,n} = (R_s + y_n) \Omega \cos \theta \quad (3.5.9)$$

$$w_{0,n} = (R_s + y_n) \Omega \cos \theta \quad (3.6.0)$$

Se pasa entonces, a la construcción del sistema de ecuaciones lineales, para ello se expresa  $w_{m,n}$  como un vector  $w_p$ :

$$w_p = w_{m,n} \quad (3.6.1)$$

$$p_{m,n} = mN_y + n \quad (3.6.2)$$

$$p = 0, \dots, (N_x - 1)(N_y - 1) \quad (3.6.3)$$

Dado que conocemos los valores de  $W$  en el contorno, los puntos externos de la cuadrícula no serán incluidos en el sistema de ecuaciones lineales como incógnitas:

$$A_{ij}W_j = f_i \quad (3.6.4)$$

$$i, j = 1, \dots, (N_x - 2)(N_y - 2) \quad (3.6.5)$$

La matriz de coeficientes se construye superponiendo los aportes de cada punto  $i$  de la cuadrícula:

$$A_{ij} = \sum a^i \quad (3.6.6)$$

$$a^i_{i,i-1} = h_y^2 \quad (3.6.7)$$

$$a^i_{i,i+1} = h_y^2 \quad (3.6.8)$$

$$a^i_{i,i} = -2(h_x^2 + h_y^2) \quad (3.6.9)$$

$$a^i_{i,i+y} = h_y^2 \quad (3.7.0)$$

$$a^i_{i,i+y} = h_x^2 \quad (3.7.1)$$

El termino independiente  $f_i$ , incluye tanto la constante  $k$  como el aporte de las condiciones de contorno impuestas:

$$f_i = k - W_i^* \quad (3.7.2)$$

El aporte de las condiciones de contorno se define como:

- Si  $m = 1$   $W_i^* = h_y^2 W_{0,n}$  (3.7.3)

- Si  $m = N_x - 2$   $W_i^* = h_y^2 W_{N_x-1,n}$  (3.7.4)

- Si  $n = 1$   $W_i^* = h_x^2 W_{m,0}$  (3.7.5)

- Si  $n = N_y - 2$   $W_i^* = h_x^2 W_{m,N_y-1}$  (3.7.6)

Se debe ajustarse la matriz de coeficientes acordemente para balancear las ecuaciones.

## Integración Numérica

La integral para el cálculo del flujo se aproxima de la forma:

$$Q = \sum_{m=0}^{N_x-1} \sum_{n=0}^{N_y-1} W_{m,n} h_x h_y \quad (3.7.7)$$

### 3.1.4 Estudio del Fenómeno de die Swell

El Modelo de Modelo de Brandao-Spieth-Lekakou (Modelo Analítico) y el Modelo de Maxwell (Modelo Numérico por Volúmenes Finitos), son utilizados para medir el “*die-swell*”, que sufre el material al salir de la extrusora, los resultados obtenidos por ellos son comparados entre sí.

#### 3.1.4.1 Modelo Analítico Numérico basado en el Método de Volúmenes Finitos (CFD)

La implementación de este modelo, se prueba utilizando los valores reportados en las tablas 7 y 8, que corresponde al material de prueba LDPE (Polietileno de Baja Densidad). Además, se utiliza ViscoelasticInterFoam Solver, el cual es un paquete de CFD (Computational Fluid Dynamics) desarrollado por Favero et al, (2010) en OpenFOAM, usado para el análisis de fluidos viscoelásticos en superficie libre y que utiliza la metodología VOF (Volumen-of-Fluid). Vale la pena resaltar que este solver es una extensión del trabajo de Favero et al., (2009), llamado ViscoelasticFluidFOAM, para el tratamiento de fluidos viscoelásticos usando OpenFOAM software. La discretización de las ecuaciones que gobiernan el flujo en OpenFOAM software, está basada en el Método de Volúmenes Finitos, colocando un arreglo de variables como presión y velocidad del solvente. Este software ofrece un amplio rango de esquemas de interpolación, solvers y pre acondicionamientos para la discretización del sistema algebraico de ecuaciones (Favero et al., 2009 – 2010).

Se modeló la geometría bidimensionalmente, con las medidas ilustradas en la figura 10, las cuales definen las condiciones de contorno del problema.

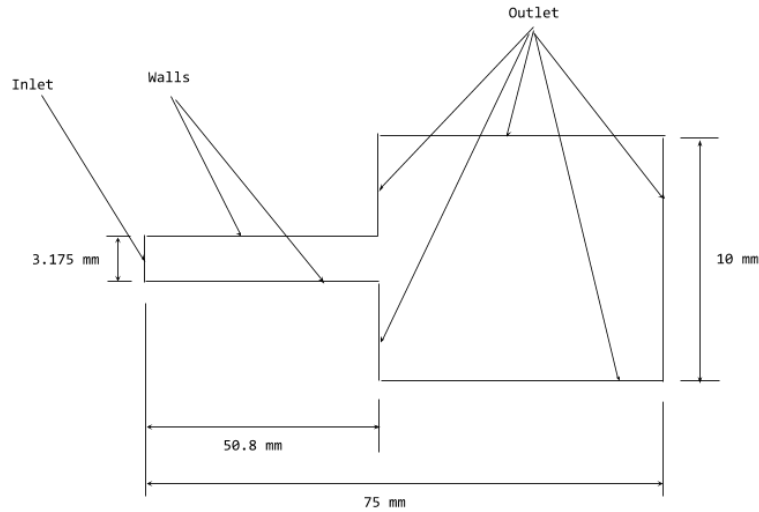


Figura 10. Modelamiento de la geometría del dado de extrusión.

La discretización del dominio se realizó con el aplicativo BlockMesh de OpenFOAM, para un total de 16000 celdas hexagonales, tal como se muestra en figura 11, donde se observa la malla y el detalle de su refinamiento:

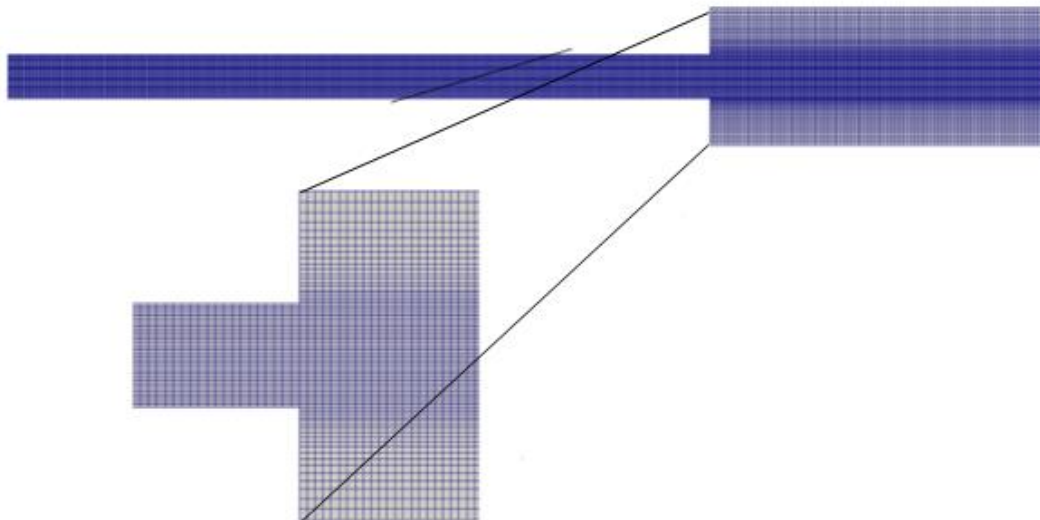


Figura 11. Enmallado de la geometría del dado de extrusión.

Las siguientes son las condiciones de contorno utilizadas según las regiones indicadas:

- Inlet: ingreso de polímero a una velocidad de 1.0 m/s.
- Walls: condición de contorno de muro no deslizante.
- Outlet: condición de salida de material con presión 0 Pa.

El modelo viscoso es laminar, con dos fases y los siguientes parámetros:

- Fase 1:

Material: Polímero fundido

Modelo: Maxwell lineal

Densidad: 801.87 Kg/m<sup>3</sup>

Viscosidad del solvente: 0.002 Pa·s

Viscosidad del polímero: 1400 KPa·s

Tiempo de relajación del polímero: 0.03 s

- Fase 2:

Material: Aire

Modelo: Maxwell lineal

Densidad: 1 kg/m<sup>3</sup>

Viscosidad del solvente: 0 Pa·s

Viscosidad del polímero: 1.48 e<sup>-5</sup> Kpa

Tiempo de relajación del polímero: 0 s

La dinámica de la simulación es transiente, con los siguientes parámetros:

- Paso temporal inicial: 1e-6 s
- Tiempo final: 0.155 s
- Paso temporal ajustable: Si, criterio de número de Courant máximo
- Número de Courant máximo: 0.2
- Máximo paso temporal: 1e-4

## Capítulo 4

### Resultados y Discusión

Los resultados se presentan de acuerdo al orden en que se plantearon las etapas del proceso de extrusión.

#### 4.1 Caracterización Reológica de mezclas TPS/PLA

Se obtienen los resultados de las composiciones para las distintas formulaciones, según la Regla de las Mezclas, como se muestran en las tablas 5 y 6. En el Anexo 2, se presentan los cálculos y resultados de cada mezcla en particular en las 7 - 11.

**Tabla 7. Densidad de mezclas TPS/PLA y materiales constituyentes**

Formulación	Densidad (g/ml)					PLA
	F0	F1	F2	F3	F4	
PLA seco*						1.24
GTPS*	3.68					
GTPS/PLA		3.14	2.64	2.14	1.68	
<b>Denominación</b>	<b>GTPS</b>	<b>80/20</b>	<b>60/40</b>	<b>60/40</b>	<b>80/20</b>	<b>PLA</b>

Los valores marcados con \*, son tomados de Dorlan et al., (2000), Gu et al., (2008), Huneault et al., (2007) y Wasserman et al., (1996).

**Tabla 8. Fracción volumen de mezclas TPS/PLA y materiales constituyentes**

Formulación	Fracción de volumen					PLA
	F0	F1	F2	F3	F4	
PLA seco		0.22	0.43	0.63	0.82	1.00
GTPS	1.00	0.78	0.57	0.37	0.18	
GTPS/PLA		1.00	1.00	1.00	1.00	
<b>Denominación</b>	<b>GTPS</b>	<b>80/20</b>	<b>60/40</b>	<b>40/60</b>	<b>20/80</b>	<b>PLA</b>

Estos resultados se utilizaron para el cálculo de los parámetros de entrada para la caracterización reológica usando PASTA, como se muestra en la tabla 13.

**Tabla 12. Valores de los parámetros de entrada al software PASTA, para caracterización reológica.**

Datos mezclas GTPS/PLA						
Componentes						
	GTPS	PLA	F1	F2	F3	F4
<b>Parámetros</b>						
n (mol)	1	1	1	1	1	1
M0 (g/mol)	298.35	59	250.48	202.61	154.74	106.87
Mw (g/mol)	1286000	2,026,110	1069691	853381	637072	420762
Me (g/mol)	115000	8700	123700	123700	123700	123700
$\rho$ (g/cm <sup>3</sup> )	3.68	1.24	3.14	2.64	2.14	1.68
Z*	11	24	9	7	5	3
R (dina*cm/mol*K)	83140000	83140000	83140000	83140000	83140000	83140000
T (K)	337.43	332.91	335.17	337.45	335.17	335.17
Gn (MPa)*	0.12	0.50	0.10	0.80	0.65	0.51
p(índice de polidispersidad)*	5.9	2.5	5.2	4.40	3.80	3.1

Los valores marcados con (\*), fueron calculados con las ecuaciones (2.4 – 2.6) consignadas en el capítulo 2.

En esta sección se hace la caracterización reológica de las mezclas TPS/PLA y sus materiales constituyentes. Con la caracterización se pretende obtener el valor de la viscosidad, propiedades visco elásticas ( $G'$  y  $G''$ ), esfuerzos normales ( $\tau$ ), diferencias de esfuerzos normales ( $N_1$  y  $N_2$ ), así como las distintas curvas contra frecuencia ( $\omega$ ).

Tal como se había explicado en el capítulo 3, sección 3.1.2., Las simulaciones se realizaron en un computador portátil marca Hewlett-Packard (HP®), modelo Pavilion g4-2050la Notebook PC, con procesador Intel Core i3-2350M, 6GB RAM, 640GB HDD, WLAN & Bluetooth. El tiempo de duración de la simulación de la mezcla F2 con COGNAC fue de 3 horas y 100.000 iteraciones La simulación con PASTA para cada mezcla fue de 15 min, independiente del tipo de material (constituyente o mezcla).

Además del módulo PASTA, el software OCTA®, cuenta con el modulo COGNAC (Coarse – Grained Molecular Dynamics Simulator), que permite observar cómo va cambiando la proporción de los materiales constituyentes en una mezcla respecto al tiempo, para la modelación se tomó como muestra la mezcla F2, tal como se observa en las figuras 12 – 15.

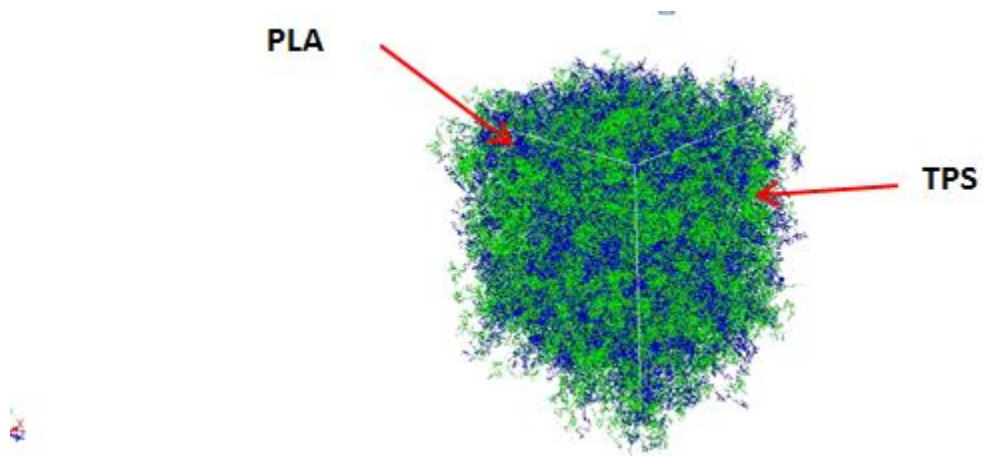


Figura 12. Mezcla F2 (60% GTPS/ 40% PLA) en el  $t = 0$  s. Tomado del: Módulo COGNAC (Coarse – Grained Molecular Dynamics Simulator) Software OCTA.

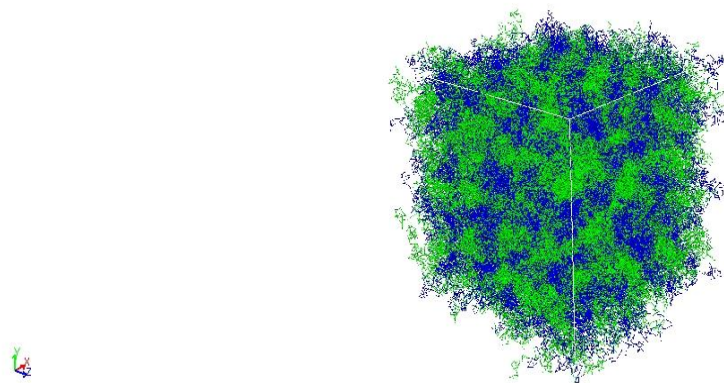


Figura 13. Mezcla F2 (60% GTPS/ 40% PLA) en el  $t = 4$  s. Tomado del: Módulo COGNAC (Coarse – Grained Molecular Dynamics Simulator) Software OCTA.

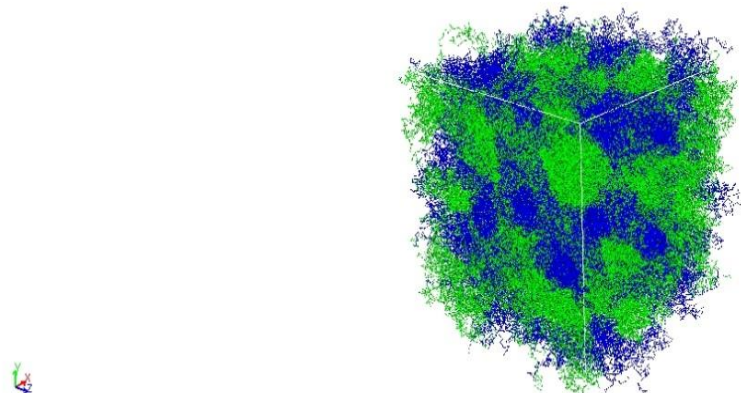




Figura 14. Mezcla F2 (60% GTPS/ 40% PLA) en el  $t = 7$  s. Tomado del: Módulo COGNAC (Coarse – Grained Molecular Dynamics Simulator) Software OCTA.

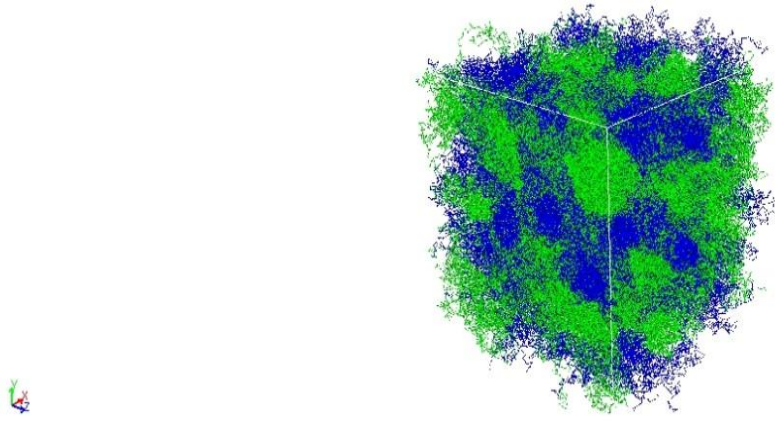


Figura 15. Mezcla F2 (60% GTPS/ 40% PLA) en el  $t = 10$  s. Tomado del: Módulo COGNAC (Coarse – Grained Molecular Dynamics Simulator) Software OCTA.

Los resultados de la caracterización reológica por simulación utilizando PASTA, basado en Dinámica Molecular, bajo las condiciones descritas en la tabla 12., se presentan en la figura 16. En general se observa el comportamiento de la viscosidad del PLA, TPS y las mezclas TPS/PLA, presentan una región plana (Plateau Newtonian), lo cual está de acuerdo a los resultados encontrados por Huneault et al., (2007) y Zhang et al., (2011), puesto que la caracterización para sus formulaciones TPS/PLA y materiales constituyentes (utilizando un reómetro capilar), presentan este mismo comportamiento. Se observa además que el orden de magnitud de las mezclas que contienen PLA están por encima de  $10^3$ , mientras que el TPS presenta una viscosidad mucho más baja del orden de  $10^2$ , tal como lo muestra Zhang et al., (2011).

Según lo reportado en la literatura, por lo general, el PLA puro, tiene una mayor viscosidad, respecto a las mezclas con TPS y glicerina (glicerol) como plastificante; pues la presencia de este ayuda a la reducción de la viscosidad de la mezcla, porque permite que el almidón fluya mejor al ser sometida a esfuerzos cortantes, tal como se observan en los trabajos de Huneault et al., (2007), Sarazin et al., (2008), Xiong et al., (2013) y Zhang et al., (2011), solo por mencionar algunos.

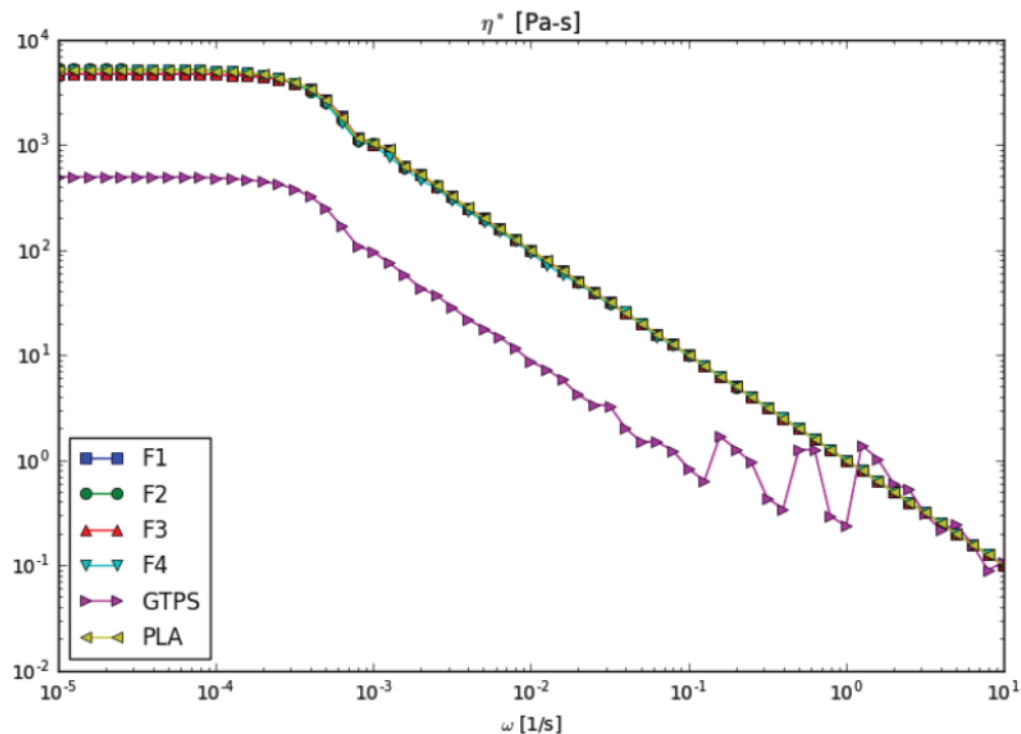


Figura 16. Comportamiento de la Viscosidad ( $\eta^*$ ) Vs la Frecuencia ( $\omega$ ), de las mezclas GTPS/PLA y los materiales constituyentes GTPS y PLA.

En la figura 16, se observa que las gráficas que describen el comportamiento de la Viscosidad Vs Frecuencia ( $\eta^*$  Vs  $\omega$ ), del PLA y mezclas TPS/PLA, se traslapan entre desee el valor de la viscosidad en frecuencia 0 ( $\eta_0^*$ ), esto se puede explicar, apoyado en el hecho que aunque se varió la proporción de los componentes en las mezcla, el parámetro MaxStrechRatio, (relación de la Longitud de cadena polimérica extendida/ Longitud de cadena polimérica en equilibrio), fue el mismo para todas, partiendo del valor tomado para el PLA (4.4), cuyo valor es reportado para PS (Poliestireno Cristal), en la librería de PASTA. Este valor se asume para el PLA, puesto que tiene la misma naturaleza química por pertenece a la familia de los poliésteres (Hamad et al., 2010, 2011., y Huneault et al., 2008) y en la literatura consultada para este trabajo, no se reporta ningún valor del MaxStrechRatio para el PLA. Es de suponer que el valor de este parámetro debe ser menor para las mezclas que para el PLA, puesto que este varia su cantidad en cada mezcla, así las mezclas con mayor contenido de PLA (F3 y F4), debían tener un mayor MaxStrechRatio, que las que tiene menor contenido de PLA (F1 y F2). De otro lado, el valor reportado del parámetro MaxStrechRatio, para el Almidón fue tomado por Gu et al. (2008), quien lo hace solo para la Amilopectina, es decir se considera entonces que el Almidón es

mayormente ramificado por este componente, que lineal por el aporte de la Amilosa. Este valor reportado es de 1.5.

A pesar de todo lo anteriormente descrito, se observa en general que el comportamiento tanto de mezclas TPS/PLA, PLA y TPS es el comportamiento de polímeros tradicionales Pseudoplástico, es decir que a medida que aumenta la frecuencia de deformación, disminuye la viscosidad, lo que permite ser utilizados en un proceso de transformación polimérica (extrusión, inyección, rotomoldeo, etc.).

**Tabla 13. Valores de viscosidad de PLA reportados en la literatura Vs PASTA**

Autor	Procedencia del PLA	Medición	$\eta_0$ (KPa*s)
Dorgan et al., (2000)	Cargill-Dow Polymers (Grado comercial)	Experimental	4,0
Huneault et al., (2007)	NatureWorks (PLA 2002D)	Experimental	5,0
Sarazin et al., (2008)	Cargill LLC (Grado no comercial 5729B)	Experimental	3,5
Xiong et al., (2013)	NatureWorks (PLA 4032D)	Experimental	1,0
Presente trabajo	NatureWorks (PLA 2002D)	Simulada	5,2

En la tabla 13., se muestran los valores del PLA reportados en la literatura para la medición de la viscosidad cero. Se observa que, el valor del PLA obtenido por simulación se encuentra en el rango de valores experimentales (igual orden de magnitud), que los reportados por los autores arriba mencionados. Sin embargo, en la tabla 14., se muestran los mismos valores de la viscosidad cero, reportados en la tabla 13, pero ahora teniendo en cuenta la frecuencia de deformación para su medición al inicio de la prueba.

**Tabla 14. Valores de viscosidad de PLA reportados en la literatura Vs PASTA**

Autor	Medición	$\eta_0$ (KPa*s)	$\omega$ (s <sup>-1</sup> )
Dorgan et al., (2000)	Experimental	4,0	10 <sup>-2</sup>
Huneault et al., (2007)	Experimental	5,0	10 <sup>0</sup>
Sarazin et al., (2008)	Experimental	3,5	10 <sup>1</sup>
Xiong et al., (2013)	Experimental	1,0	10 <sup>0</sup>
Presente trabajo	Simulada	5,2	10 <sup>-5</sup>

Teniendo en cuenta los valores reportados en la tabla 14, el valor de la viscosidad cero (es decir al inicio de la prueba), son de distinto orden de magnitud en cuanto a la frecuencia. Al compararlo con el valor de la viscosidad cero simulada, están muy alejados, lo cual implica que el software toma mediciones en tasas de deformación muy bajas y en este caso que las estas mediciones no podrían ser comparadas con las experimentales; por lo tanto, la simulación debe estar acompañada de mediciones experimentales bajo las mismas condiciones, para poder ratificar el valor medido.

De otro lado la viscosidad del TPS, es muy baja con respecto al PLA, con una desviación del 90.4%, lo cual es de esperarse, puesto que este está mezclado con glicerina que ayuda a que fluya más fácilmente al ser sometida a esfuerzos, ya que este último sirve como plastificante a la mezcla. Al comparar los valores obtenidos en la simulación con los reportados en la literatura, se encuentra que estos siempre son muy bajos, sin importar la fuente de origen del almidón Huneault et al., (2007). También se observa que la viscosidad del TPS, a una frecuencia de  $10^{-1} \text{ s}^{-1}$ , comienza a oscilar, lo cual implica que a partir de este valor el comportamiento del material es incierto.

Debido a que no se observa una diferencia marcada entre las viscosidades de las distintas mezclas, mostradas en la figura 16, se recurre a calcular el porcentaje de error entre los valores de viscosidad cero, tomando como referencia el valor de la viscosidad cero del PLA y se comparan con las distintas TPS/PLA, obteniéndose los resultados, tal como los reportados en la tabla 15.

**Tabla 15. Comparación de la variación porcentual de la viscosidad cero de mezclas GTPS/PLA y PLA.**

Referente	Mezcla	$\eta_0$ (Pa*s)	Porcentaje de error (%)
PLA (5165,525 Pa*s)	F1	4741,51	8,21
	F2	5238,61	1,41
	F3	5021,35	2,80
	F4	5157,95	0,14

Los valores de la tabla 15, muestra que, el porcentaje de variación es pequeño, lo cual justifica el traslape de las gráficas en escala logarítmica. También se observa que al aumentar el porcentaje de PLA en la formulación, el comportamiento de la viscosidad es más cercano al PLA, puesto que el porcentaje de error es menor; este comportamiento lo presenta las mezcla F3 (40% GTPS y 60% de PLA) y F4 (20%

GTPS y 80% PLA). Para efectos, del procesamiento por extrusión sería la mejor opción, puesto que su comportamiento al momento de ser extruido sería muy parecido al PLA, lo que ayudaría a disminuir costos de producción por la adición de TPS. Aunque la viscosidad es una variable influyente en el tipo de procesamiento de polímeros, los trabajos de Huneault et al. (2007) y Arias (2010), muestran que para el proceso de extrusión de mezclas GTPS/PLA, los porcentajes más recomendables de TPS (Almidón Termoplástico) varían entre 60% y 70% y de PLA varían entre 30% y 40%, pues con ello se obtienen características y propiedades parecidas a algunos de los polímeros específicos como es el caso del Poliestireno Cristal (PS), y los costos de producción bajan; en este rango de valores se ubica la mezcla F2 (60% TPS y 40% PLA). Además, delo anterior, Strong (2006) afirma que los materiales para extrusión deben tener una viscosidad alta, lo cual es el caso de la mezcla F2, De otro lado la mezcla F1 (80% GTPS y 20% PLA), a pesar de tener mayor contenido del Almidón, el valor de su viscosidad es cercano al PLA, con una variación del 10%, lo cual indica claramente que la influencia en el comportamiento de la viscosidad está dada por la características y propiedades del PLA.

## 4.2 Propiedades Viscoelásticas

La caracterización reológica, arroja también el comportamiento de los módulos de almacenamiento (comportamiento elástico) ( $G'$ ) y perdida (comportamiento viscoso) ( $G''$ ) de las mezclas GTPS/PLA y sus materiales constituyentes, conociendo de esta manera su comportamiento viscoelástico.

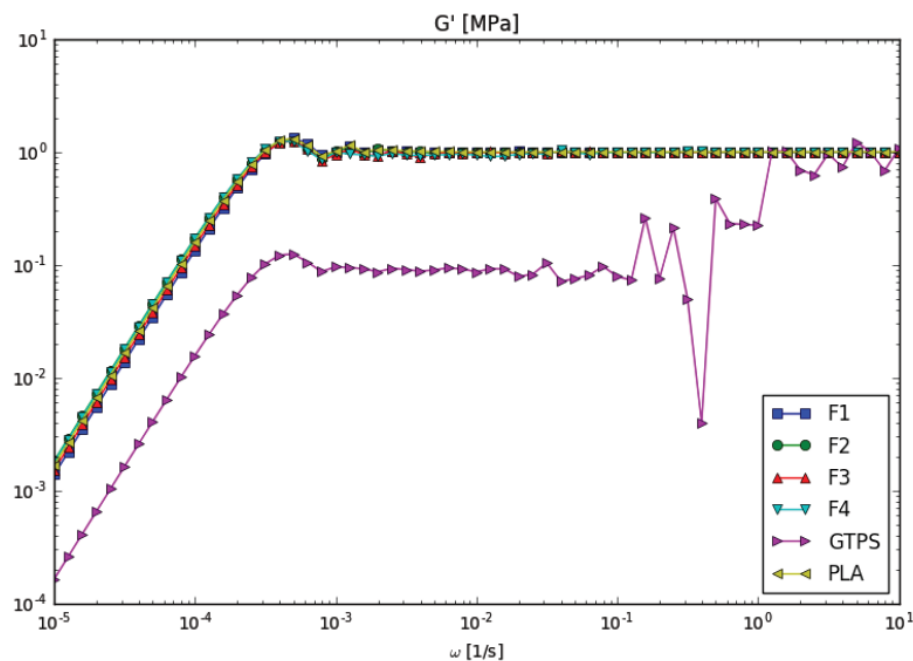


Figura 17. Módulo de almacenamiento ( $G'$ ) mezclas GTPS/PLA.

En la figura 17, se observan dos comportamientos claramente diferenciados. Uno corresponde al PLA y a las mezclas GTPS/PLA y el otro al TPS. Al igual que la figura 16, correspondiente al comportamiento de Viscosidad Vs Frecuencia, se puede ver que no se distinguen entre sí los valores del módulo  $G'$ , debido a que están sobre puestos. Esta reposición se debe al uso del mismo valor para el parámetro MaxStrechRatio, tal como se explicó en la sección 2.3.2. Además, se observa que la tendencia del comportamiento modulo  $G'$  de todas las mezclas GTPS/PLA y PLA, es el mismo frente a la frecuencia. Se puede ver claramente que a frecuencias altas el modulo  $G'$  de las mezclas GTPS/PLA y PLA, se mantiene constante hasta alcanzar frecuencias muy bajas, para después caer precipitadamente; mientras, para el GTPS, el comportamiento del módulo  $G'$  es inestable a frecuencias relativamente altas, lo que indica que para estas frecuencias de deformación ya no es posible el uso del material para fines de procesamiento. Luego a frecuencias bajas se logra mantener constante, para luego decaer drásticamente, lo cual indicaría que al procesar el GTPS sin ningún tipo de refuerzo, se debe hacer a frecuencias muy bajas, para evitar fluctuaciones en los resultados. El comportamiento anterior, es comparado con los resultados del trabajo de (Arias, 2010) y (Gui, 2012) y la tendencia es la misma, si se tiene en cuenta que ambos trabajos, se utiliza PLA, GTPS/ PLA y Poly Lactic acid/poly (butylene succinate adipate), respectivamente.

Para poder comparar los valores iniciales de los módulos  $G'$ , de las mezclas GTPS/PLA y el PLA, se recurre a un porcentaje de error (como se muestra en la tabla 16), tomando como referencia el valor del PLA, pues claramente se observa que quien marca el comportamiento viscoelástico en la mezcla es el PLA; este es un tipo de poliéster (aunque de origen natural biodegradable), tiene las características y propiedades reológicas de los poliésteres provenientes del petróleo, por lo tanto es un material viscoelástico, el cual es utilizado como refuerzo en las mezclas de estudio.

**Tabla 16. Comparación de Módulos de almacenamiento ( $G'$ ) de las mezclas GTPS/PLA.**

PLA	Formulación	Modulo $G'$ (MPa)	Variación Porcentual (%)
0,00167449 MPa	F1	0,00138581	17,2
	F2	0,00182678	8,3
	F3	0,00152745	8,8
	F4	0,00179098	6,5

Los valores correspondientes al Módulo  $G'$  son los valores iniciales de cada material. Se observa que los valores de los Módulos  $G'$  son muy cercanos entre sí

(del mismo orden de magnitud), pero la variación porcentual deja ver que a medida que se aumenta el porcentaje de PLA en la mezcla, el modulo  $G'$  se hace más parecido al PLA. Era de esperarse que la mezcla F1, estuviera más alejado del valor del módulo  $G'$  del PLA, siendo entonces el menos elástico de todas las mezclas presentadas, esto tiene una razón clara y es el alto contenido de GTPS (80%) presente en esta mezcla. Tampoco sorprende el comportamiento de la mezcla F4, pues es la que menos variación porcentual presenta frente al PLA, debido al alto contenido de este (80%), convirtiéndolo así en la mezcla más elástica. De otro lado, llama poderosamente la atención los valores de los Módulos  $G'$  de las mezclas F2 y F3 pues son muy cercanos, aunque el contenido de PLA varíe en un 20%. Teniendo en cuenta lo anterior, las mezclas que tendrían una buena recuperación elástica luego de ser sometida a esfuerzos son las F2 y F3.

En cuanto al Modulo  $G''$ , en la Figura 18, se observa que a pesar que al inicio hay una diferencia marcada entre el GTPS y el conjunto de mezclas GTPS/PLA y PLA, no se muestre diferencia alguna en los valores de estas últimas, y la tendencia de su comportamiento es el mismo. Se observa claramente que el material menos viscoso el GTPS, comparado con las mezclas GTPS/PLA que siguen el comportamiento del PLA. Llama poderosamente la atención que medida que la frecuencia aumenta, el comportamiento del Módulo  $G''$  fluctúa; lo cual indica que para altas el material no disipa la energía (esfuerzos aplicados) de manera constante.

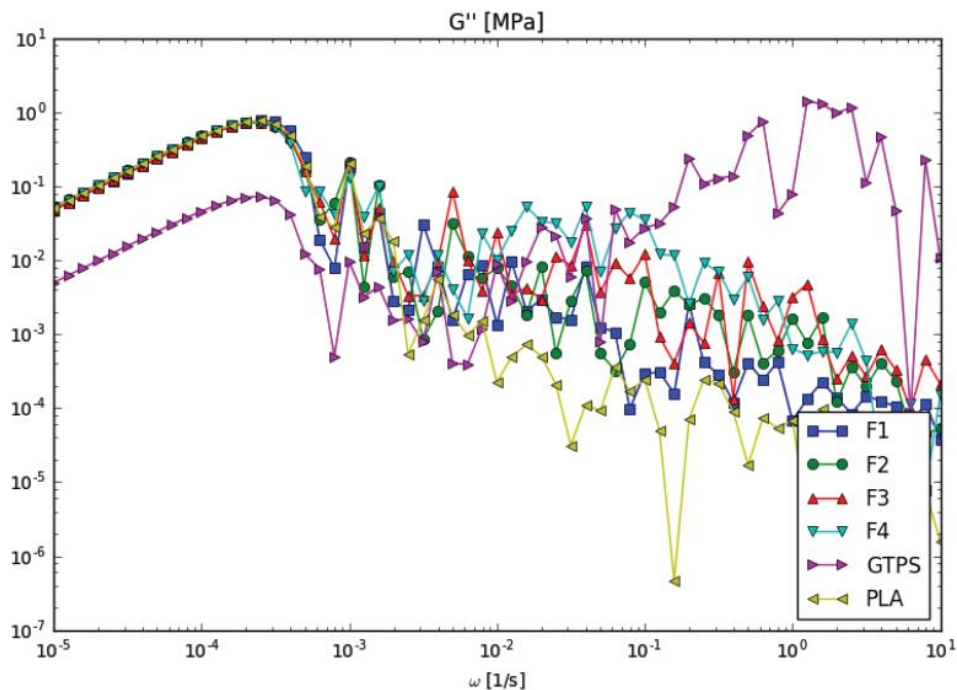


Figura 18. Módulo de pérdida ( $G''$ ) de mezclas GTPS/PLA.

Para poder comparar los valores iniciales de los módulos  $G''$ , de las mezclas GTPS/PLA y el PLA, se recurre a un análisis de varianza porcentual, tomando como referencia el valor del PLA (tabla 9), ya que claramente se observa que este es quien marca el comportamiento viscoelástico en las mezclas.

**Tabla 17. Comparación de Módulos de pérdida ( $G''$ ) de mezclas GTPS/PLA.**

PLA	Formulación	Modulo $G'$ (MPa)	Variación Porcentual (%)
0,0516281MPa	F1	0,0473948	8,2
	F2	0,0523647	1,4
	F3	0,0481893	6,6
	F4	0,0519486	0,62

Los valores correspondientes al Módulo  $G''$  son los valores iniciales de cada material. Se observa que los valores de los Módulos  $G''$  son muy cercanos entre sí (del mismo orden de magnitud), pero la variación porcentual deja ver que a medida que se aumenta el porcentaje de PLA en la mezcla, el modulo  $G''$  se hace más parecido al PLA, solo para las mezclas F1, F2 y F4. Llama la atención que la mezcla F2, es la que tiene mayor  $G''$ , es decir, es la mezcla más viscosa de todas las mezclas. También es claro que la mezcla F1, es la menos viscosa de todas las mezclas, pues es la que presenta un menor modulo  $G''$ .

#### 4.3 Comportamiento mezclas TPS/PLA fundidas

Se reportan las gráficas para cada material en el Anexo 3., y se hace la comparación con cada modelo para el estudio de fluidos No Newtonianos. En la figura 20, solo se presenta la comparación del comportamiento de las mezclas TPS/PLA y sus materiales constituyentes para el modelo de Bird-Carreau, debido a que, en un análisis realizado en particular a cada mezcla y material constituyente, se encuentra que el modelo que más se ajustó al comportamiento de los resultados obtenidos por simulación vía PASTA, fue el del modelo antes mencionado.



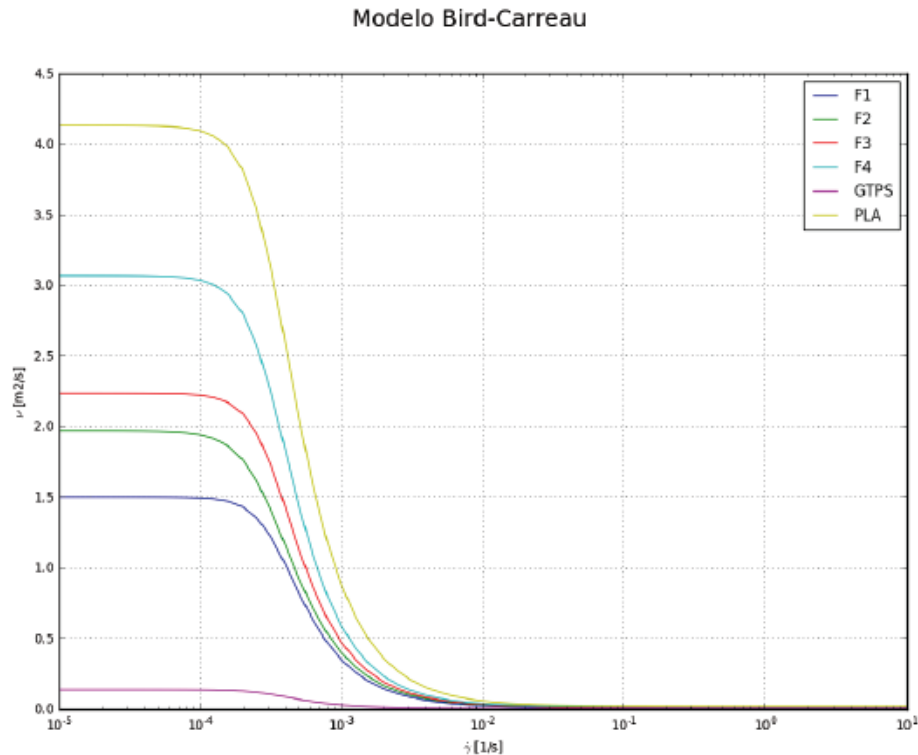


Figura 20. Comportamiento de flujo de las mezclas TPS/PLA fundidas en la extrusora.

En la figura 20, se observa el comportamiento de los materiales constituyentes TPS y PLA frente a los mezclas TPS/PLA, se puede ver que los materiales presentan un comportamiento totalmente Pseudoplástico, se pueden diferenciar más claramente las zonas claves para entender el comportamiento del polímero, al momento de ser procesado, como son: zona de viscosidad cero (primera meseta), zona de transición vítrea, zona de trabajo y viscosidad infinita (segunda meseta). comportamiento de flujo de todos los materiales, corresponden al de un fluido No-Newtoniano, debido a que la viscosidad decrece a medida que aumenta la tasa de corte, es decir que la viscosidad no es constante; característica de los polímeros termoplásticos en estado fundido (fluido Pseudoplástico. Se observa. El hecho que el modelo de Bird-Carreau se ajuste mejor que los otros modelos indica que estos materiales pueden ser estudiados en un amplio rango de tasa de corte (pequeñas o altas deformaciones) (estado estable) o frecuencia (estado dinámico), permitiendo conocer una región definida de trabajo; es decir un rango de valores de tasa de corte o frecuencia, donde la viscosidad es la apropiada para la extrusión del material.

Es claro ver que estos materiales, no necesitan de un esfuerzo inicial adicional para empezar a fluir como es el caso de los materiales poliméricos que se comportan de acuerdo al Modelo de Herschel-Bulkley. Además, podría decirse que el Modelo de la Ley de Potencia (The Power Law Model), se ajuste bien al comportamiento del

TPS y PLA, luego de la zona de transición vítrea de estos, para luego igualar su comportamiento en la segunda meseta; por lo cual se puede concluir que luego de ciertos valores de velocidad de corte, la viscosidad de estos materiales se hace constante.

#### 4.4 Modelos analíticos y numéricos para la extrusión de polímeros

Se hace la validación para los modelos analíticos y numéricos, arroja los siguientes comportamientos, los cuales se reportan en las figuras 21 al 24.

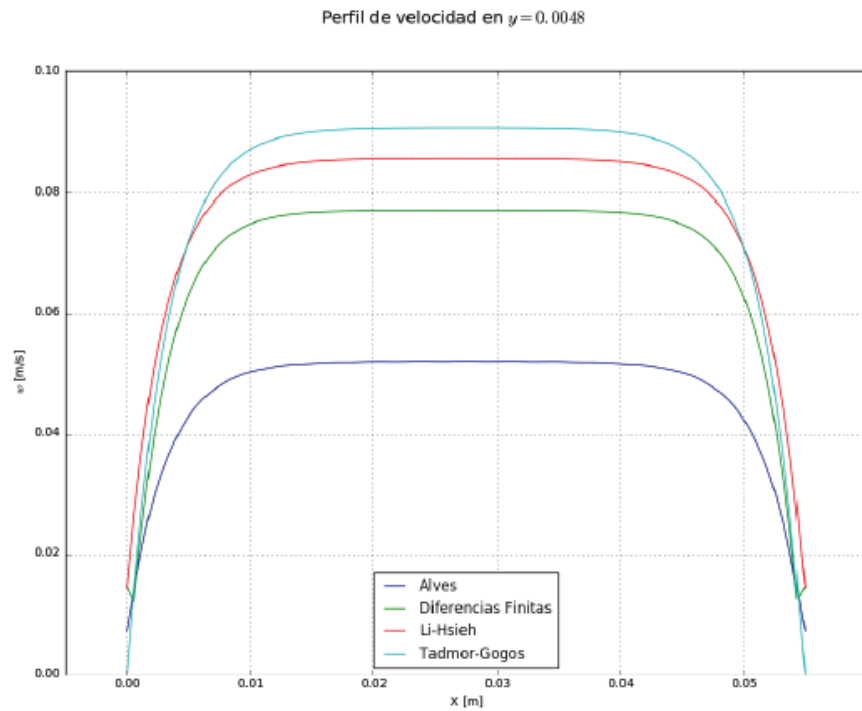


Figura 21. Comparación de Modelos Analíticos y Numéricos, para el comportamiento de la Velocidad de flujo Vs ancho del canal, fijando la profundidad del canal.

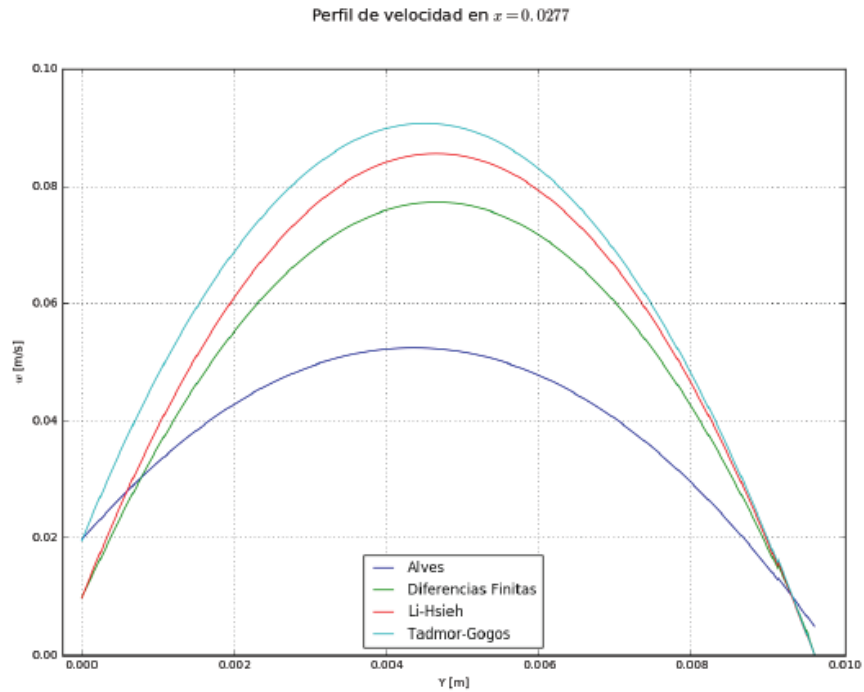


Figura 22. Comparación de Modelos Analíticos y Numéricos, para el comportamiento de la Velocidad de flujo Vs profundidad del canal, fijando el ancho del canal.

Las figuras 21 y 22, muestran el comportamiento del LDPE, para los modelos tanto analíticos como numéricos, para la velocidad de flujo, variando ancho y profundidad del canal. Se observa que todos tienen la misma tendencia en el comportamiento del flujo, sin embargo, el Modelo de Tadmor, alcanza la máxima velocidad de flujo en la parte de media del canal. Esto es debido a que este modelo está basado en la Teoría Hidrodinámica de Rowell y Finlayson (1922, 1928), la cual no considera el movimiento de las aletas del tornillo en las condiciones de contorno, haciendo que la velocidad del tornillo aumente, puesto que no se produce un flujo de arrastre por contribución de las aletas.

A pesar de lo anterior el Modelo de Tadmor sigue siendo la base para los diseños de las extrusoras reales por que considera relaciones de  $W/H > 1$ , lo cual se es necesario para el procesamiento de polímeros por las características y propiedades de los mismos, mientras que los modelos de Li-Hsieh y Alves, consideran el movimiento de las aletas del tornillo y el barril fijo. Vale la pena resaltar que el modelo de Li-Hsieh considera  $W/H > 1$ , al igual que el Modelo de Tadmor, mientras que Alves lo hace con  $W/H < 1$ , es decir relaciones bajas a intermedias.

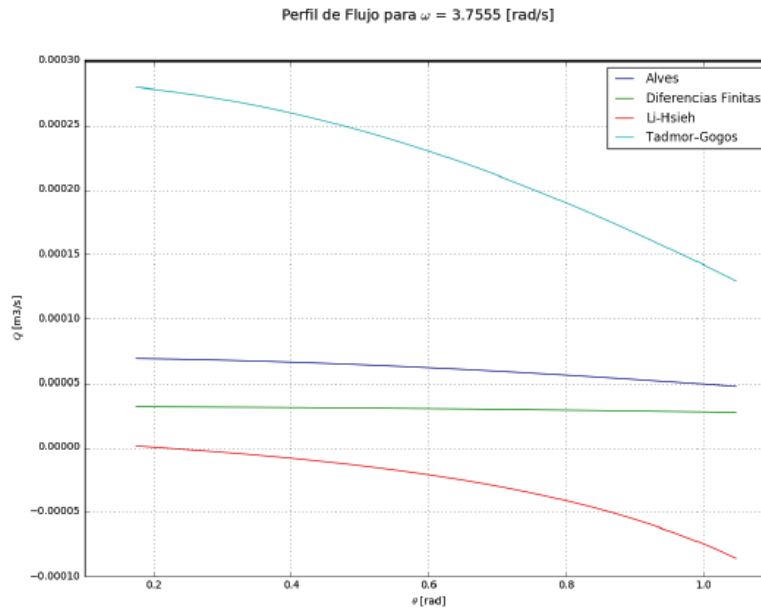


Figura 23. Comparación de Modelos Analíticos y Numéricos, para el comportamiento del Caudal Vs Angulo de Hélice del tornillo, fijando la velocidad del tornillo.

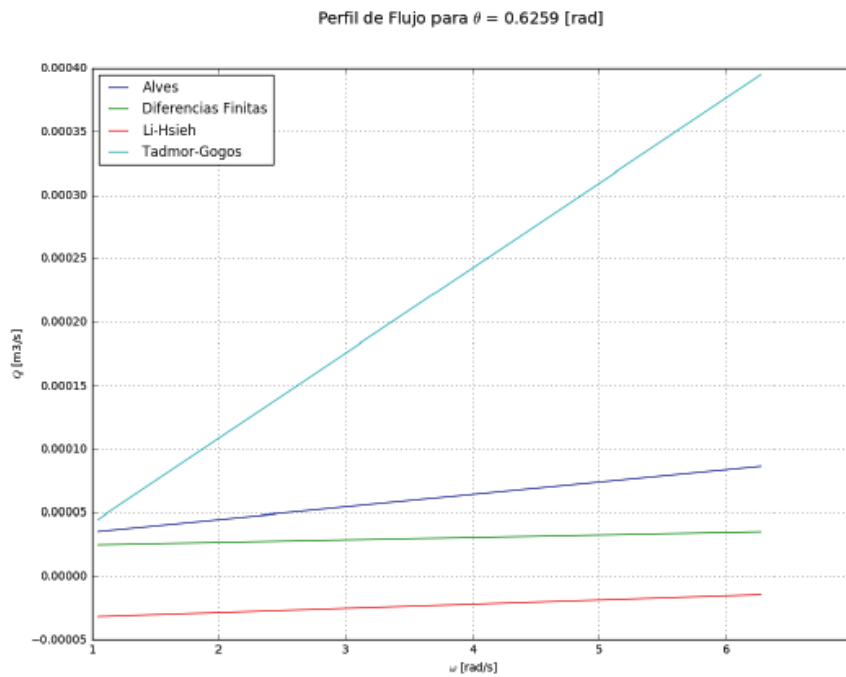


Figura 24. Comparación de Modelos Analíticos y Numéricos, para el comportamiento del Caudal Vs Velocidad del tornillo, fijando el ángulo de hélice del tornillo.

En las figuras 23 y 24, se observa el comportamiento del LDPE, para los modelos analíticos y numéricos, para el caudal, variando velocidad y ángulo de hélice del

tornillo. Es claro, que los modelos describen la misma tendencia en el comportamiento del caudal, pero nuevamente el Modelo de Tadmor, muestra el mayor caudal, que los otros modelos, esto debido a que está planteado para un rango mayor de velocidad de operación del tornillo y que además desprecia el movimiento de las aletas, así como el movimiento del cuerpo del tornillo.

De otro lado en la figura 25, se presenta el análisis del comportamiento del perfil de velocidad del flujo de la mezcla F2 (60% GTPS/40% PLA) en el tornillo  $V_z(x)$ , al variar el ancho del canal ( $x$ ), medidos a diferentes profundidades del mismo ( $y$ ), para los distintos modelos

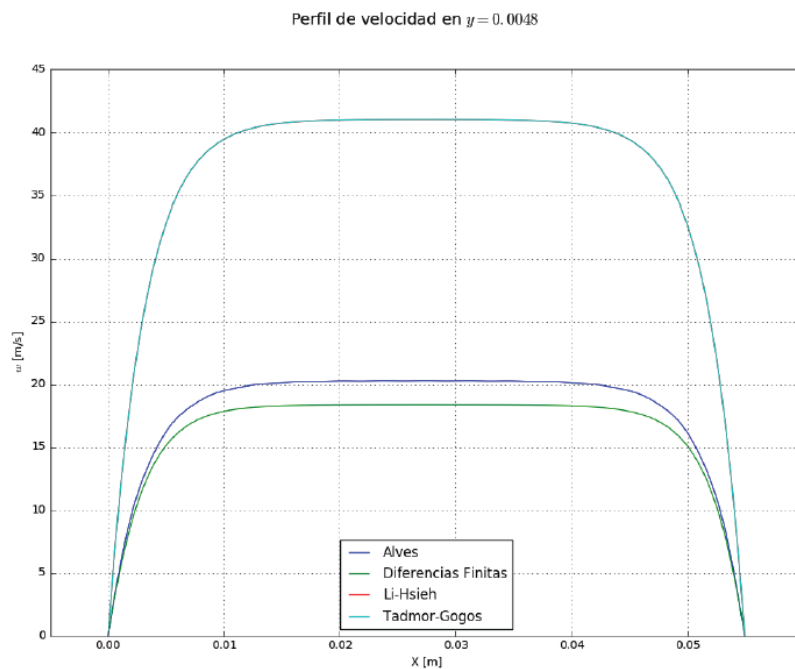


Figura 25. Comportamiento de la velocidad de flujo a lo ancho del canal del tornillo, con variación de la profundidad de canal del tornillo

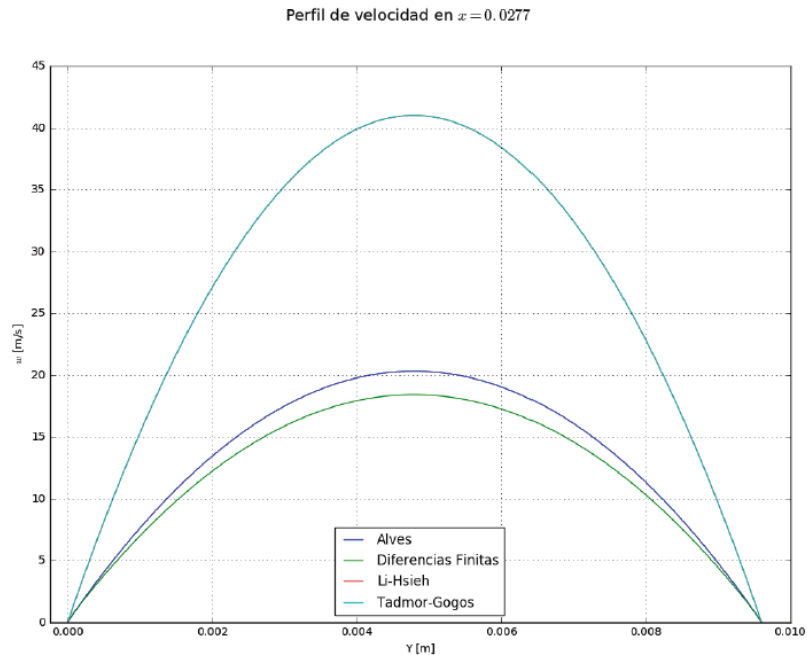


Figura 26. Comportamiento de la velocidad de flujo en la profundidad del canal del tornillo, con variación del ancho del canal

En la figura 25, se observa que el comportamiento de la velocidad es el mismo, es decir muestra un comportamiento parabólico cóncavo hacia abajo con un plano en la parte superior. Se observa como la velocidad comienza a crecer lentamente desde el inicio (primeros valores) del cancho del canal, hasta lograr estabilizarse, y mantenerse constante en los valores medios del mismo (generando un rango amplio de valores donde se genera esta condición de operación), para luego disminuir lentamente; lo cual indica que la velocidad es cero en los extremos del canal (valores mínimos y máximos).

De otro lado se observa como varia la velocidad de flujo, al utilizar distintas profundidades del canal del tornillo. Llama la atención, que valores de profundidad mínimo y máximo, la velocidad es cero (0.0 m/s) a lo ancho del canal, mientras que si trabaja con valores de profundidad medios, la velocidad aumenta.

El la figura 26, comportamiento de la velocidad de flujo al variar la profundidad del canal ( $y$ ), medidos a diferentes anchos del mismo, es decir muestra un comportamiento parabólico cóncavo hacia abajo. Se observa como la velocidad comienza a crecer lentamente desde el inicio (primeros valores) de la profundidad del canal, alcanzando su punto máximo en los valores medios de la profundidad del tornillo, para luego disminuir lentamente; lo cual indica que la velocidad es cero en los extremos del canal (valores mínimos y máximos).

De otro lado se observa como varia la velocidad de flujo, al utilizar distintos anchos del canal del tornillo. Llama la atención, que valores de ancho mínimo y máximo, la velocidad es cero (0.0 m/s) a lo ancho del canal, mientras que, si trabaja con valores medios, la velocidad aumenta, pero esta vez no se genera un rango de valores donde las condiciones de operación sean máximas, sino en un valor específico.

Llama la atención que el modelo de Modelo de Tadmor, alcanza la máxima velocidad de flujo en la parte de media del canal. Esto es debido a que este modelo está basado en la Teoría Hidrodinámica de Rowell y Finlayson (1922, 1928), la cual no considera el movimiento de las aletas del tornillo en las condiciones de contorno, haciendo que la velocidad del tornillo aumente, puesto que no se produce un flujo de arrastre por contribución de las aletas, pero también se observa que el modelo de Li-Hsieh, se sobrepone con el Modelo de Tadmor, lo cual demuestra que para la profundidad y ancho del canal evaluada, la consideración del movimiento de las aletas o no es indiferente..

En general, el comportamiento de la velocidad de flujo en la profundidad del canal, variando el ancho de este, es el mismo; pues no se observan diferencias significativas en la tendencia de la velocidad, por lo tanto, los tres modelos dan un resultado coherente entre sí, que podría ser utilizado para el diseño del tornillo, si se tiene en cuenta el tipo de material al cual se está procesando. Teniendo en cuenta que, si bien es cierto la solución Numérica por Diferencias Finitas, tendría una mayor precisión que los resultados de los modelos analíticos presentados, estas soluciones se dan de manera discreta, dejando espacios entre los rangos de valores sin ser tenidos en cuenta. Además, los modelos analíticos no necesitan obligatoriamente herramientas computacionales para su solución, también se tienen dificultades para dar solución a estos, debido a la gran cantidad de parámetros necesarios para su solución.

Los resultados que se presentan, están basados en el cálculo de las variables caudal ( $Q_z$ ) y presión ( $P_z$ ), usando los Modelos Analíticos de Tadmor y Li-Hsieh; y el Modelo Numérico por Diferencias Finitas. Para el estudio del caudal o flujo volumétrico ( $Q_z$ ) través de la Extrusora de tornillo único, marca C.W Brabender – Tipo 2523, se estudiaron las variables: velocidad angular ( $\omega$ ) y ángulo de hélice del tornillo ( $\phi$ ), las cuales son parámetros relevantes en los modelos analíticos.

En este análisis de resultados, se hace una comparación entre los resultados obtenidos por los modelos analíticos y numéricos. En la figura 21 se muestra el comportamiento del caudal ( $Q_z$ ), respecto a la velocidad angular del tornillo, para un Angulo de hélice determinado En la figura 27, se muestra el comportamiento del caudal ( $Q_z$ ), respecto al ángulo de hélice ( $\phi$ ), para distintos valores de la velocidad angular del tornillo.

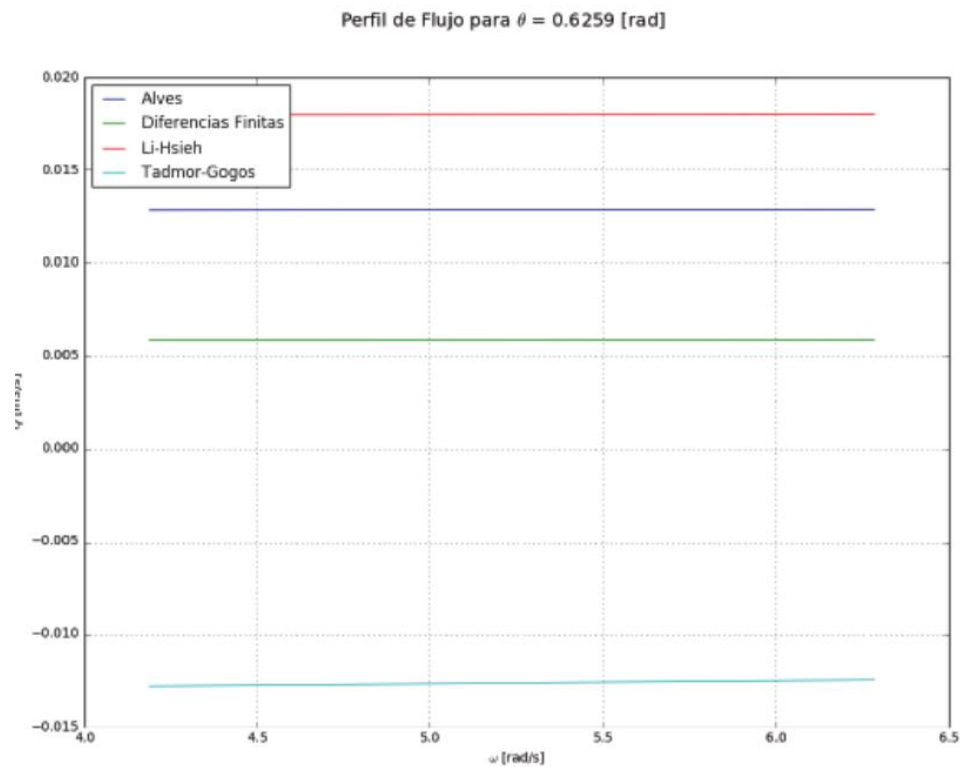


Figura 27. Comportamiento del caudal ( $Q_z$ ), respecto a la velocidad angular del tornillo, para un Angulo de hélice.

Se observa que el caudal ( $Q_z$ ), hacia dentro del tornillo, tiene un comportamiento constante a medida que aumenta la velocidad del mismo, sin embargo las diferencias entre los modelos, radica en el hecho de las consideraciones hechas sobre cada una de las condiciones de contorno definidas para estos. En este caso, el modelo de Li-Hsieh, da el mayor valor de caudal, pues considera de las aletas del tornillo y del cuerpo, además que la relación  $W/H > 1$ .

En la Figura 28, se muestra el comportamiento del caudal ( $Q_z$ ), se observa un comportamiento constante del caudal ( $Q_z$ ), frente al aumento del ángulo de hélice, para los modelos de Tadmor, Alves y por Diferencias finitas. Es posible que ocurra, porque para el modelo de Tadmor al no considerar el movimiento de la hélice del tornillo, no importe las características de sus aletas. Llama la atención el comportamiento que describe Alves, pero este podría recaer en el hecho de la relación  $W/H < 1$ , hace que la incidencia del Angulo de hélice sea muy pequeña que no ejerza mayor influencia sobre el caudal. Por el caso del Modelo de Li-Hsieh, que describe un comportamiento parabólico creciente hacia arriba, lo cual indica que el ángulo de hélice si es un factor determinante para la velocidad del tornillo.



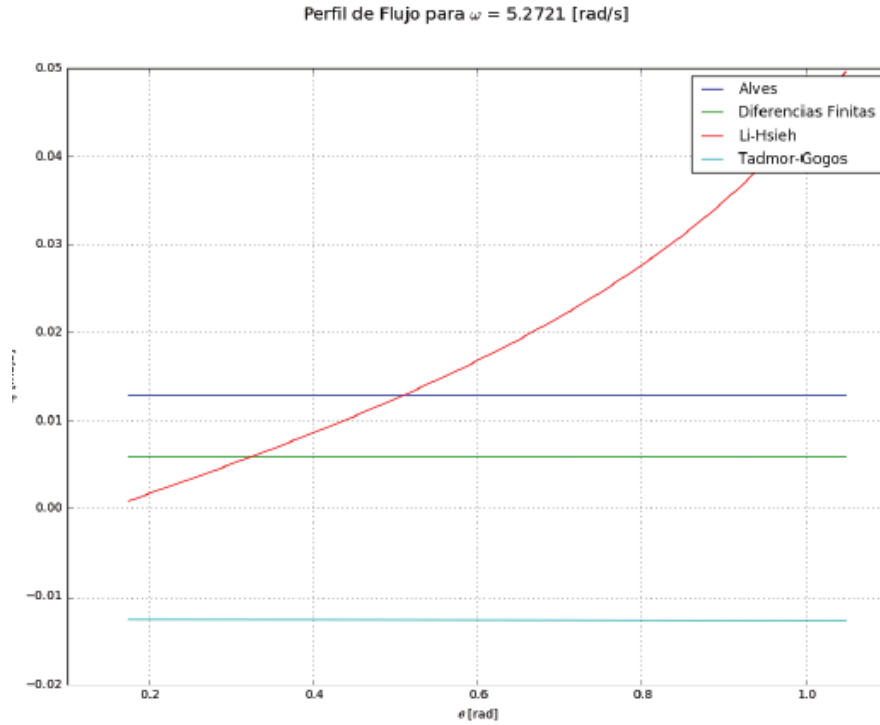


Figura 28. Comportamiento del caudal ( $Q_z$ ), respecto al ángulo de hélice ( $\phi$ ), para un valor de la velocidad angular del tornillo.

De otro lado, en la figura 29 y 30; se observa que el comportamiento de la presión en dirección hacia adentro del canal según el Modelo de Tadmor y Modelo de Li-Hsieh, decae a medida que aumenta la longitud del canal hacia dentro del tornillo, es decir cuando pasa de un extremo a otro. Vale la pena aclarar que para estos modelos la presión no es relevante, debido a las consideraciones que hacen sobre el fluido. Este descenso se explica por mismo movimiento del fluido a medida que es transportado en la extrusora.

Teniendo en cuenta lo anterior, se observa entonces que los dos modelos muestran el mismo comportamiento. No se compara este comportamiento con el Modelo de Alves ni el Modelo Numérico, debido a que no se obtuvo un perfil de presión hacia adentro del canal del tornillo.

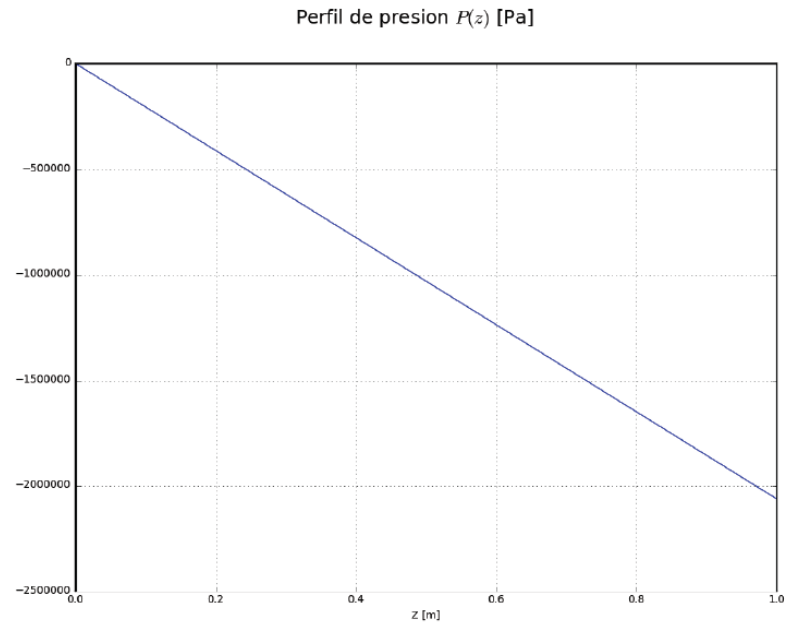


Figura 29. Perfil de Presión, en dirección del movimiento del flujo, obtenido por el Modelo de Tadmor.

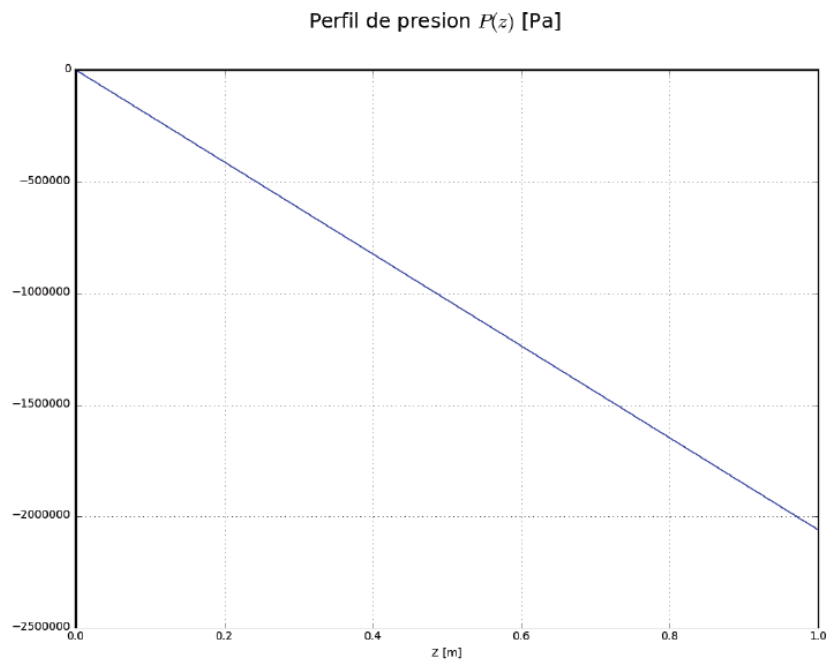


Figura 30. Perfil de Presión, en dirección del movimiento del flujo, obtenido por el Modelo de Li-Hsieh.

#### 4.5 Modelado analítico y numérico del fenómeno del “die swell”

Se hace la implementación del modelo analítico de Brandao- Spieth- Lekakou, como prueba con LDPE, esta es realizada usando el software Jupyter (lenguaje Python), el cual se resuelve la ecuación constitutiva del modelo Para esta solución, se utilizan los resultados reportados en la literatura del trabajo de Huang et al., (1980).

**Tabla 18. Parámetros de entrada del LDPE para el Modelo de Brandao-Spieth-Lekakou.**

Parámetros de entrada	Valores
Nombre del polímero	LDPE
Temperatura de fusión (K)	453.15
Densidad (Kg/m <sup>3</sup> )	0.81
Viscosidad (Pa-s)	6000
Flujo másico (Kg/s)	0.02 Kg/s
Temperatura de trabajo en el dado	423.15

Tomados de Huang et al., (1980).

**Tabla 19. Geometría del dado (C.W. Brabender) No. 05-54-000 Horizontal**

Dado de sección transversal Horizontal Plana	
Diámetro del dado (m)	0.003175
Longitud del dado (m)	0,0508
Ancho del dado (m)	0,15261

En la figura 31., Se hace la comparación de los valores obtenidos, para la Primera Diferencia de Esfuerzos Normales, se observa que coinciden con la curva de ajuste. El comportamiento de los datos obtenidos está de acuerdo a los resultados presentados en los trabajos de Huang et al., (1980) y Anand et al., (1980), pues es evidente que el fundido aumenta su elasticidad, al incrementar el esfuerzo de corte, lo cual es sostenido por la Teoría de Recogimiento Elástico de Tanner.

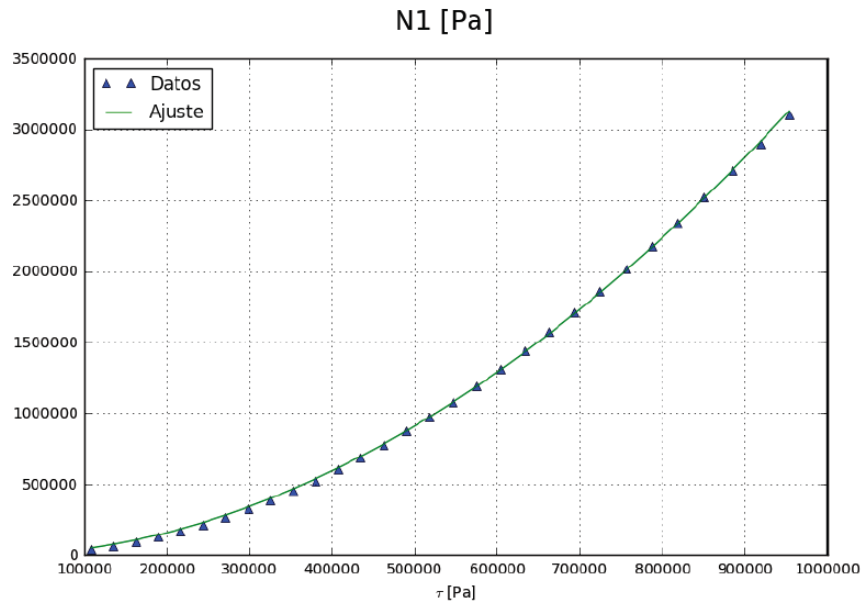


Figura 31. Primera diferencia de esfuerzos normales Vs Esfuerzo de corte.

Luego de tener el ajuste de curvas y buscar las constantes propias del material con la ecuación (4.5), se obtiene el modelo:

$$B = (1 + 1.559 \times 10^{-11} \tau_w^{1.833})^{1/6} + 0.12 \dots\dots\dots (2.40)$$

Al resolver la ecuación (240), se observa que el Die-Swell, aumenta al aumentar el esfuerzo de corte en las paredes del dado como se muestra en la figura 32, lo que está de acuerdo el comportamiento del Die Swell, medido experimentalmente en los trabajos de Anand et al., (1980), Brandao et al., (1996) y Huang et al., (1980) y la Teoría de Recogimiento Elástico de Tanner (1970).

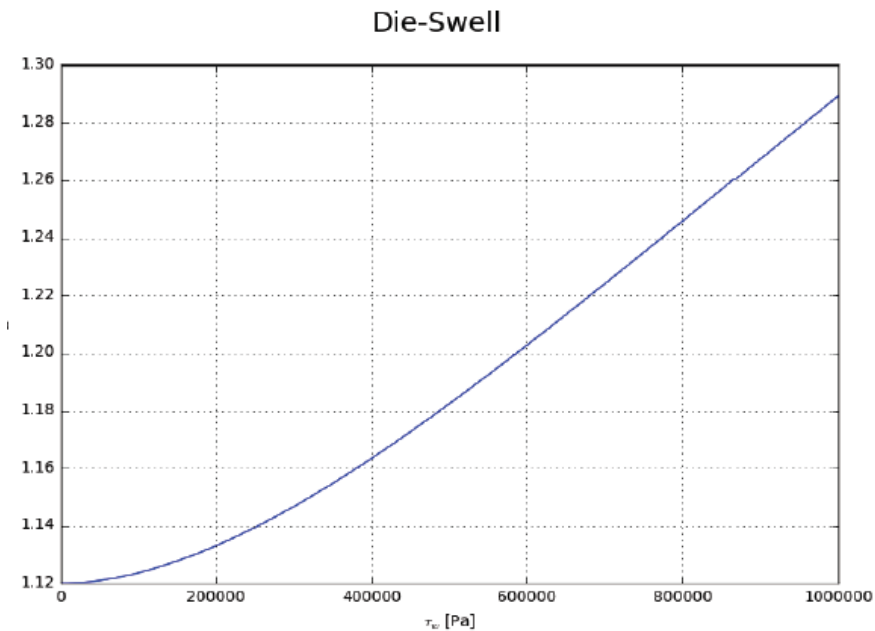


Figura 32. Comportamiento del Die-Swell Vs Esfuerzo de Corte.

En cuanto a la validación con el trabajo de Huang et al., (1980), encuentra que el Die Swell (B), obtenido por el modelo de Brandao–Spieth-Lekakou, está en el rango de valores obtenidos experimentalmente (1.2 – 2.5).

#### 4.6 Modelo Analítico Numérico basado en el Método de Volúmenes Finitos (CFD)

La implementación de este modelo, se hace utilizando los valores reportados en las tablas 18 y 19. Además se utiliza ViscoelasticInterFoam Solver, el cual es un paquete de CFD (Computational Fluid Dynamics) desarrollado por Favero et al, (2010) en OpenFOAM, usado para el análisis de fluidos viscoelásticos en superficie libre y que utiliza la metodología VOF (Volume-of-Fluid). Vale la pena resaltar que este solver es una extensión del trabajo de Favero et al., (2009), llamado ViscoelasticFluidFOAM, para el tratamiento de fluidos viscoelásticos usando OpenFOAM software. La discretización de las ecuaciones que gobiernan el flujo en OpenFOAM software, está basada en el Método de Volúmenes Finitos, colocando un arreglo de variables como presión y velocidad del solvente. Este software ofrece un amplio rango de esquemas de interpolación, solvers y pre acondicionamientos para la discretización del sistema algebraico de ecuaciones (Favero et al., 2009 – 2010).

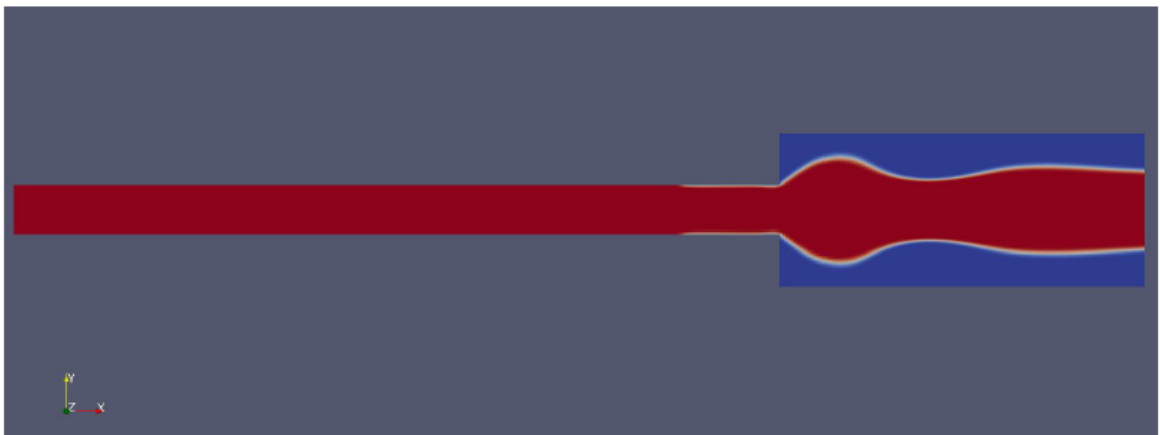


Figura 33. Comportamiento del LDPE en la extrusora.

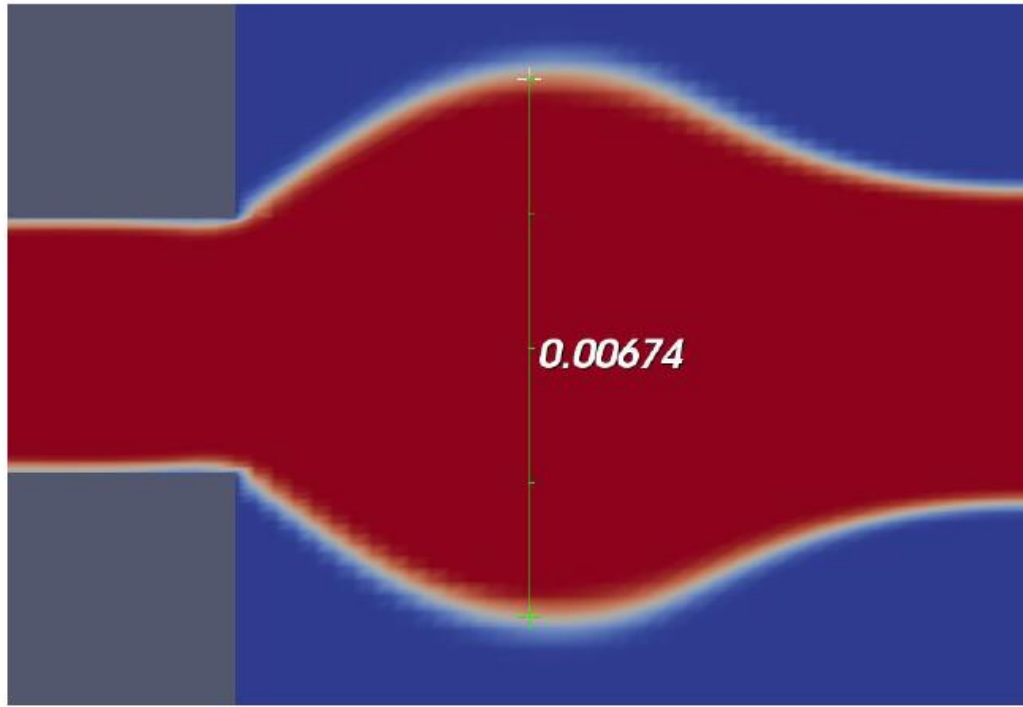


Figura 34. Die Swell del LDPE justo a la salida del dado

Lo anterior se reporta un valor de  $B = 2.123$ , el cual está en el rango de valores de las trabajos experimentales para medir Die Swell, reportados en la sección 4.5, pero no está de acuerdo con el valor encontrado por el modelo analítico de Brandao-Spieth- Lekakou, debido a que el Modelo de Maxwell, no es el adecuado para materiales viscoelásticos.

#### **4.7. Aplicación de los modelos al estudio del comportamiento de la mezcla F2 bajo el fenómeno de “die-swell”**

##### **4.7.1 Modelo Analítico de Brandao- Spieth- Lekakou**

El fenómeno de Die Swell, se estudió en la mezcla GTPS/PLA con formulación F2 (60/40), teniendo en cuenta las propiedades viscoelásticas de esta, frente a las formulaciones F1, F3 y F4. La mezcla GTPS/PLA (60/40), se hace pasar por una extrusora con venteo C.W Brabender Tipo 2523 (N° 1417), para obtener perfiles de sección transversal rectangular (laminas), teniendo en cuenta las condiciones de operación que se listan en la tabla 14.

**Tabla 20. Parámetros de entrada para el Modelo de Brandao-Spieth-Lekakou.**

Parámetros de entrada	Valores
Nombre del polímero	Mezcla F2 (60/40)
Temperatura de fusión (K)	473.15
Densidad (Kg/m <sup>3</sup> )	2640.0
Viscosidad (Pa-s)	0.0694
Flujo másico (Kg/s)	0.02 Kg/s
Temperatura de trabajo en el dado	413.15

\*Los valores de estos parámetros son propios de cada polímero (materiales constituyentes o mezclas).

\*\*Se define, según las condiciones de operación requeridas que se ajusten a las propiedades reológicas del polímero (materiales constituyentes o mezclas).

Teniendo en cuenta lo anterior y los cálculos realizados para dar solución a las ecuaciones del modelo, se obtienen los valores de las constantes empíricas.

**Tabla 21. Valores de constantes empíricas para el modelo de Brandao-Spieth-Lekakou.**

Constante	Valor
$A_1$	$2.447 \times 10^{-8}$
$A_2$	$5.448 \times 10^{-17}$
$a_1$	$2.999 \times 10^{-20}$
$a_2$	$2.797 \times 10^{-20}$

En la figura 35., se observa el comportamiento de la  $N_1$  (diferencia entre los dos primeros esfuerzos principales en el fluido) Vs esfuerzo de corte del fluido ( $\tau$ ) para el Modelo Analítico de Brandao-Spieth-Lekakou, debido al movimiento del tornillo en la extrusora. Se observa además que el ajuste realizado a los datos obtenidos en la literatura, se acopla de manera satisfactoria a los resultados obtenidos en la simulación basada en Dinámica Molecular en el módulo PASTA. Es claro que  $N_1$  aumenta de manera exponencial a medida que aumenta ( $\tau$ ), lo cual indica que las cadenas del polímero se van alineando a medida se aplica el esfuerzo, lo cual es congruente debido a que el flujo del polímero debe ser estable y laminar antes de salir del dado de extrusión, para evitar problemas en el producto final.

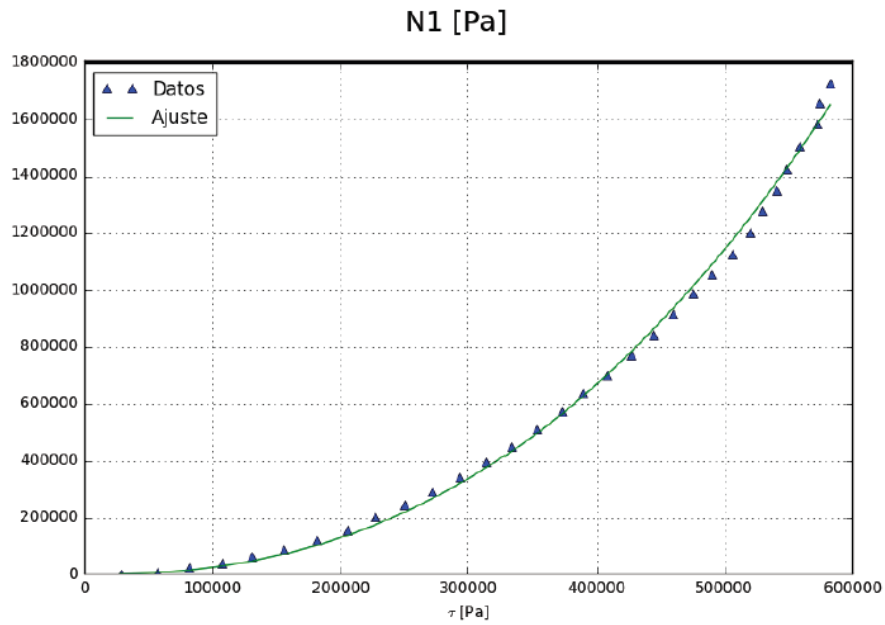


Figura 35. Comportamiento de  $N_1$  Vs  $\tau$ , la mezcla F2.

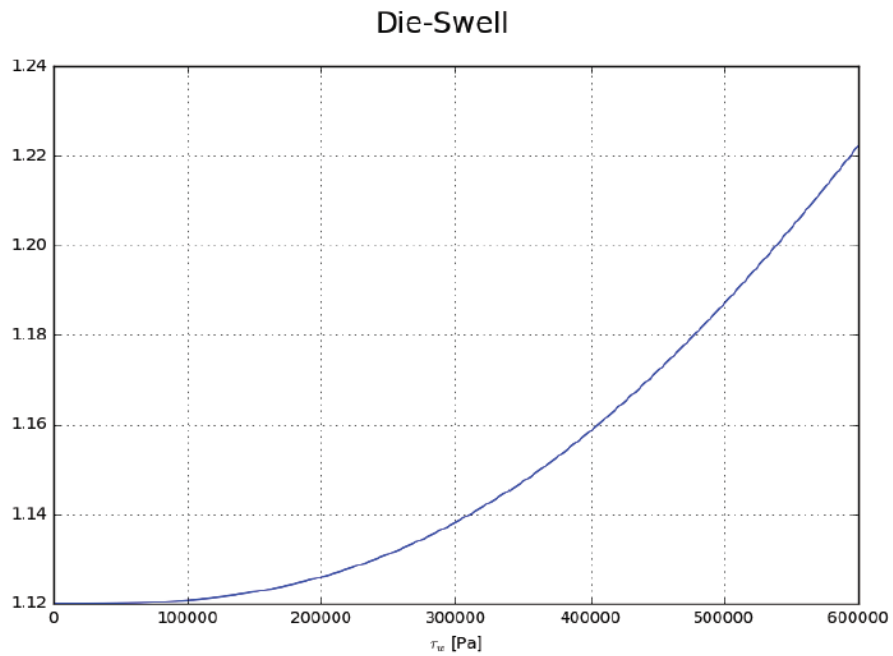


Figura 36. Comportamiento de B (Die Swell) Vs  $\tau_w$ .

Este comportamiento indica, que la mezcla F2 (60/40), a medida que aumenta los esfuerzos en la pared del dado, la expansión elástica es mayor, lo que no sería



conveniente para el producto final por que se fácilmente se pierden las dimensiones esperadas en este. Lo anterior, puede ser debido a las características viscoelásticas del PLA.

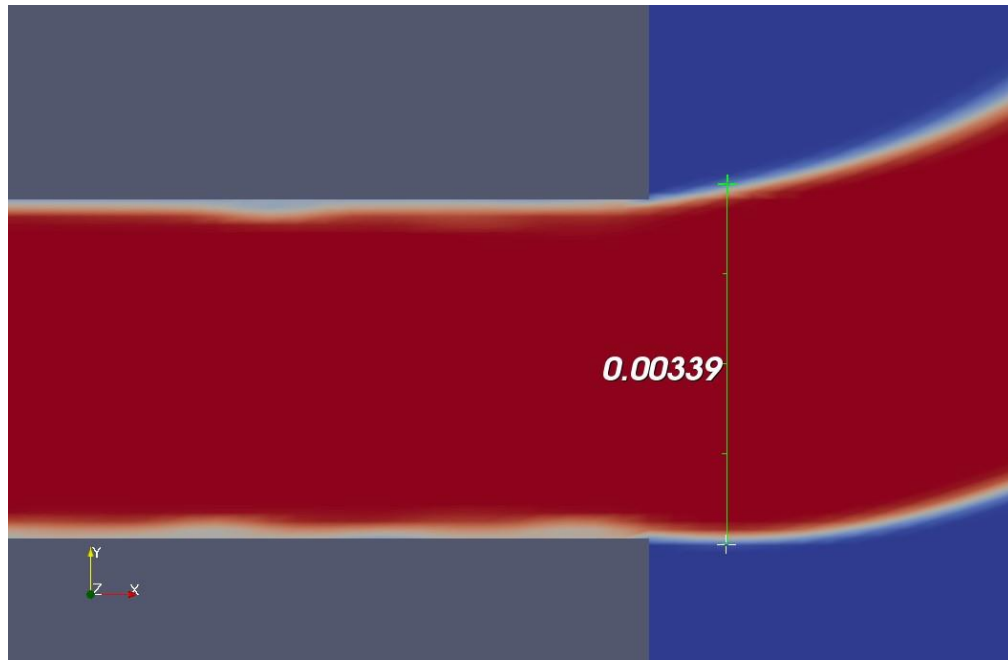


Figura 34. Comportamiento de la mezcla fundida F2 al salir del dado de extrusión según modelado CFD.

Finalmente, se obtiene la expansión del material  $B_{\text{analítico}} = 1.16950$  (1.170),  $B_{\text{CFD}} = 1.0677$  (1.068), con un 8.7068% de error; lo cual indica que hay una diferencia aceptable en los modelos, si se tienen en cuenta los supuestos y restricciones para cada uno de ellos. Sin embargo, llama poderosamente la atención del comportamiento de la mezcla F2, pues si se compara con el comportamiento del LDPE, mostrado en la figura 33 y 34, es totalmente distinto, puesto que para la mezcla no se muestra la expansión del polímero.

Esto puede tener su origen en que la diferencia entre densidades y viscosidades de los polímeros es muy grande, y el software ViscoelasticInterFoam Solver, solo ha sido probado para polímeros con densidades y viscosidades muy bajas para polímeros tradicionales no degradables. Las características de F2, es posible que cause un flujo turbulento y no laminar como son las suposiciones que considera el Modelo de Maxwell.

## **Capítulo 5**

### **Conclusiones recomendaciones**

#### **5.1 Conclusiones**

La caracterización reológica de los materiales constituyentes (TPS y PLA) por Dinámica Molecular, muestra que estos materiales presentan una tendencia en el comportamiento de acuerdo a los resultados experimentales reportados en la literatura, aunque los valores de viscosidad cero, se dan en ordenes de magnitud muy diferentes a los reportados en la literatura, por lo tanto, se haría necesaria la experimentación para validar estos resultados. Además, se presentan oscilaciones en los resultados obtenidos, lo sugiere que estos métodos de simulación están diseñados para trabajar en la zona de bajas tasas de deformación.

Los valores de viscosidad de las mezclas F1, F2, F3 y F4, deberían tener una marcada diferencia entre sí y con respecto al PLA, pero el uso del mismo valor del parámetro MaxStrechRadio, conlleva a que estos valores sean muy cercanos y se traslapen entre sí, lo cual indica que, para el uso de esta técnica, se deben complementar con el cálculo de parámetros obtenidos experimentalmente.

Estos materiales, pueden ser utilizados en los procesos de transformación, según sea el requerimiento del producto. Específicamente, la mezcla F2, puede ser utilizada en extrusión de lámina, que estén sometidas a grandes esfuerzos debido a su composición y comportamiento reológico.

Los modelos tanto analíticos como numéricos, guardan relación entre si, en el comportamiento de la trayectoria descrita tanto para velocidad de flujo como para caudal, pero estos no coinciden en los valores obtenidos debido a las restricciones, establecidas en sus condiciones de contorno. Sin embargo, son utilizados en la industria, por las características que manejan para la geometría del tornillo.

Para la velocidad de flujo, todos los modelos coinciden con que esta es máxima en la mitad del canal del tornillo y que se hace cero hacia los extremos. Lo cual sugiere que para alcanzar mayor velocidad de flujo el ancho y la profundidad del canal deben altos.

Con el Modelo de Tadmor, se observa que el material tiene una mayor velocidad de flujo, pero mueve menor cantidad de flujo. Sin embargo, es el más usado en diseños de extrusoras reales porque la relación de ancho/profundidad del canal del tornillo es mayor a .1, lo que ayuda a que material pueda procesarse mejor durante el proceso de extrusión.

Las mezclas TPS/PLA y sus materiales constituyentes, describen un comportamiento que se ajustan bien a los modelos de tornillo para extrusión, que fueron creados para polímeros tradicionales. Los resultados obtenidos están de acuerdo a las restricciones planteadas para cada modelo, tal como se reporta en la literatura para los polímeros tradicionales provenientes del petróleo.

Se realizó validación de los modelos analítico y numérico (CFD) para el fenómeno de die-swell, utilizando resultados reportados en la literatura, con el material LDPE. Cualitativamente, se puede apreciar el fenómeno de expansión y la variación de diámetro en el chorro de extruido del modelo numérico. Cuantitativamente, se encuentra que las magnitudes predichas por los modelos implementados concuerdan satisfactoriamente con los valores reportados en la literatura. Se considera entonces que los modelos implementados son válidos.

Se aplicaron los modelos implementados a la mezcla F2 (GTPS/PLA), en las condiciones de operación objeto de estudio del presente trabajo de investigación. Se encuentra que, a pesar de las particularidades en el flujo del chorro del extruido predicho por el modelo numérico, se puede percibir el fenómeno de die-swell de forma apreciable. La comparación entre el valor predicho por el modelo numérico y el modelo analítico, muestra una correlación entre ellos.

Dados los hallazgos evidenciados, se considera que los modelos implementados resultan adecuados para la evaluación cualitativa y cuantitativa del fenómeno de die swell, dentro de los límites impuestos por las restricciones de los modelos numéricos y analíticos.

## **5.2 Recomendaciones**

Hay necesidad de nuevos parámetros que se incluyan a los modelos ya existentes para polímeros tradicionales, para el ajuste del comportamiento de los resultados o que se propongan nuevos modelos para materiales biodegradables (“puros” o multicomponentes).

Los resultados de los trabajos que se realicen en esta área, no deben apuntar que sean parecidos al comportamiento de los polímeros tradicionales, puesto que, al entender el comportamiento de los nuevos materiales propuesto, se contribuye a la construir la base de datos de la comunidad científica que trabaja en esta área.

### **5.2.1 Trabajos futuros**

Implementación de Modelo Analíticos no lineales (K-BKZ, Phan-Thien-Tanner, Giesekus) para el estudio del fenómeno de Die Swell, en mezclas de polímeros biodegradables, reforzado con material particulado como con fibras.

Estudio del comportamiento del polímero fundido en la extrusora, variando las condiciones de operación de velocidad de tornillo y temperatura en las distintas zonas de la extrusora.

Estudio del comportamiento del fenómeno de Die Swell en mezclas de polímeros biodegradables variando condiciones de operación y geométricas del dado, como: temperatura, presión, velocidad de flujo, velocidad de corte y tipo de dado.

Creación de un banco de propiedades y diseño de mezclas con materiales biodegradables propios del Departamento de Bolívar para aplicaciones de uso común y especializado, utilizando simulación computacional basada en Dinámica Molecular.

## **Bibliografía**

Li Y., Hsieh F. (1996): Modeling of flow in a single screw extruder. *Journal of Food Engineering* 27, pp. 353-375.

Vinicius M., Alves C., Barbosa J., Prata A. (2009): Analytical Solution of Single screw extrusión applicable to intermediate values of screw channel aspect ratio. *Journal of Food Engineering*. 92, pp. 152 – 156.

Useche J. (2002): Hidrodinamic behaviour of polymers melts in screw pumps analytical and computational modelling. *Universidad Tecnológica de Bolívar*.

Limtrakarn W., Pratumwal Y., Krunate J., Prahsarn C., Phompan W., Sooksomsong T., Klinsukhon W. (2013): Circular Die Swell Evaluation of LDPE Using Simplified Viscoelastic Model. *AIJSTPME*, pp. 59 – 68.

Gu S.Y., Zhang K., Ren J., Zhan H. (2008): Melt rheology of polylactide/poly (butylene adipate-co-terephthalate) blends. *Carbohydrate Polymers* 74, pp. 79 -85.

Arias M. J. (2010): Evaluación y caracterización de mezclas de almidón de yuca y poli (ácido láctico) para el proceso de extrusión. Proyecto de grado. Universidad de los Andes, Bogotá; Colombia.

Rauwendaal C. (2014): *Polymer Extrusion*. Fifth Edition. Hanser Publishers, Munich.

Han Ch. (2007): *Rheology and Processing of Polymeric Materials*. Volume I: *Polymer Rheology*. Oxford University Press; New York.

Shaw M. T., Macknight W. J. (2005): *Introduction to Polymer Viscoelasticity*. Third Edition. John Wiley & Sons Inc, New Jersey.

Nielsen L., Landel R. (1994): *Mechanical Properties of Polymers and Composites*. Second Edition. Marcel Dekker Inc, New York.

Han Ch. (1981): *Multiphase Flow in Polymer processing*. Academic Press, New York.

Osswald T., Ruddolph N. (2015): *Polymer Rheology: Fundamentals and Applications*. Hanser Publishers, Munich.

Owens R. G., Phillips T. N. (2005): *Computational Rheology*. Imperial College Press, London.

- Haile J. M. (1992): Molecular Dynamic Simulation: Elementary Methods. Jhon Wiley & Sons Inc. New York.
- Favero J. (2009): Viscoelastic Flow Simulation in OpenFOAM: Presentation of the Viscoelastic Fluid Foam Solver. Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Brasil.
- Ferry J. D. (1980): Viscoelastic Properties of Polymers Third Edition. Jhon Wiley & Sons, New York.
- Bastoli C. (2014): Handbook of Biodegradable Polymers. Second Edition. Smithers Rapra Technology Ltd, Shawbury, UK.
- Scott G. (2002): Degradable Polymers: Principles and Applications. Second Edition. Kluwer Academic Publisher, London
- Utracki L. A. (2002): Polymer Blends Handbook. Volume I. Kluwer Academic Publisher, London.
- Japan Chemical Innovation Institute (JCII). (2005): OCTA (Integrated simulation system for soft materials): RHEOLOGY SIMULATOR PASTA, User's Manual. Octa User's Group.
- Tadmor Z., Gogos C. G. (1979): Principles of Polymer processing. John Wiley & Sons, New York.
- Stevens M., Covas J. (1995): Extruder principles and operation. Second Edition, Chapman & Hall, New York.
- White F. M. (2005): Viscous Fluid Flow. Third Edition. Mc Graw Hill Inc.
- Gibson R. F. (1994): Principles of composite material mechanics. Mc Graw Hill Inc, New York.
- Levi E. (1971): Mecanica del Medio Continuo. Limusa-Wiley, S.A., Mexico.
- Salcedo F. (2007): Reseña histórica de los polímeros. Notas de clase. Universidad de Los Andes, Bogota; Colombia.
- Dealy J., Wissbrun K. (1999): Melt Rheology and its role in plastics processing: theory and applications. Kluwer academic publishers, London.
- Japan Chemical Innovation Institute (JCII). (2014): Computer Simulation of Polymeric Materials Applications of the OCTA System. Springer.
- Goff J., Whelan T. The Dynisco Extrusion Processors Handbook. Second Edition. Krupp Werner and Pfleiderer Inc.

Cherizol R., Sain M., Tjong J., (2015): Review of Non-Newtonian Mathematical Models for Rheological Characteristics of Viscoelastic Composites. Green and Sustainable Chemistry.

Favero J., Cardozo N., Secchi A., Jasak H., (2010): Simulation of Free Surface Viscoelastic Fluid Flow Using the ViscoelasticInterFoamSolver. 20th European Symposium on Computer Aided Process Engineering –ESCAPE20.

Favero J., Cardozo N., Secchi A., Jasak H., (2010): Viscoelastic Fluid Analysis in Internal and in Free Surface Flows Using the Software OpenFOAM. Computers and Chemical Engineering 34, 1984 – 1993.

Kaseem M., Hamad K., Deri F. (2012): Thermoplastic Starch Blends: A review of Recent Works. Polymers Science, Vol. 54 No. 2, pp. 165 – 176.

Wang K. (2012): Die Swell of Complex Polymeric Systems. Intech.

Huneault M., Li H. (2007): Morphology and properties of compatibilized polylactide/thermoplastic starch blends. Polymers 48, pp. 270 – 280.

Versteeg H. K., Malalasekera W. (2007): An Introduction to COMPUTATIONAL FLUID DYNAMICS. The Finite Volume Method. Second edition. Pearson Prentice Hall.

Macosko Ch. W. (1994): RHEOLOGY: Principles, Measurements and Applications. Wiley – VCH, Canada.

Morrison F. (2001): Understanding Rheology. Oxford University Press. New York – Oxford.

Wen Y, Lin H., Chang H., Hua Chi. (2004): An experimental appraisal of the Cox\_merz rule and Laun's rule based on bidisperse entangled polystyrene solutions. Polymer 45, pp. 8551-8559.

Tanner R. I., (1970): A Theory of Die-Swell. Journal of polymer Science: Part A-2. Vol. 8, pp. 2067-2078.

Doi M., Takimoto J., (2012): Molecular modeling of entanglement. The Royal Society 361, pp. 641-652.

Sirisinha C., (1997): A review of extrudate swell in Polymers. J.Sci.Soc. Thailand 23, pp. 259-280.

Brandao J., Spieth E., Lekakou C., (1996): Extrusion of Polypropylene. Part I: Melt Rheology. Polymer Engineering and Science. Vol 36, N° 1, pp. 49-55.

Song M., Xu Q., Hu G., Wu S., (2006): Dynamics of Polymeric Fluid: Part II The Molecular Theory Die Swell: Correlation of Ultimate Die Swelling Effect to the Molecular Parameters and the Operational Variables. J Mater Sci. Technol, Vol. 22, N° 5, pp. 664-676.

Kuliche W., Porter R., (1980): Relation between steady shear flow and dynamic rheology. Rheol. Acta 19, pp. 601-605.

Wasserman S., Graessley W., (1996): Prediccion of inear Viscoelastic Response for Entangled Polyolefin Melts from Molecular Weight Distribution. Polymer Engineering and Science. Vol. 36, N°6, pp. 852-861.

Palade L., Lehermeier H., Dorlan J., (2000): Melt Rheology of High L-Content Poly (lactic acid). Macromolecules 2001, 34, pp. 1384-1390.

Shapiro J., Halmos A., Pearson J., (1976): melting in Single Screw Extruders. Polymers Vol. 17, pp. 905-918.

Bird B., (1976): Useful Non-Newtonian Models. Recuperado de [www.annualreviews.org](http://www.annualreviews.org) by Glasgow Universisty, pp. 13-33.

Anand J., Bhardwaj I., (1980): Die Swell behavior of Polypropilene – An Experimental Investigations. Rheol. Acta 19, pp. 614-622.

Dus S., Kokini J., (1990): Prediction of the Non-Linear Viscoelastic properties of a hard wheat flour dough: using the Bird-Carreau Constitutive Model. The Society of Rheology, Inc. 34, pp.1069-1084.

Liang J., (2001): Estimation of Die-Swell ratio for Polymer melts from exit pressure drop data. Polymer Testing 20. Pp.29-31.

Liang J., (2008): Effects of Extrusion Conditions on Die-Swell behavior of Polypropilene/Diatomite composite melts. Polymers Testing 27, pp. 936-940.

Wu D., Zhang Y., Zhang M., Zhou W., (2008): Phase behavior and viscoelastic response of polylactide/poly ( $\epsilon$ -caprolactane) blend. European Polymer Journal 44, pp. 2171-2183.

Dorlan J., Lehermeier H., Mang M., (2000): Thermal and Rheological Properties of Commercial-Gradea Poly (lactic acids). Journal of Polymers and the Environment Vol. 8, N° 1., pp. 2000-2016.



## Anexos 1. MODELOS MATEMATICOS PARA EXTRUSION

### MODELO MATEMÁTICO ESTÁNDAR PARA EXTRUSIÓN DE FLUIDOS NEWTONIANOS ISOTÉRMICOS “MODELO DE TADMOR”

Este modelo matemático de flujo isotérmico de un fluido newtoniano en tornillos de canales poco profundos, es el resultado de una ecuación simple de diseño. Este sirve como el clásico modelo de bombeo una extrusora de tornillo único (Tadmor, 2006). Para entender mejor este modelo, en la figura 14., se muestra la geometría del tornillo de la extrusora con algunos parámetros que necesarios para el desarrollo del modelo. Dónde,  $W$ : ancho (inclinado) del canal entre aletas,  $e$ : ancho de la aleta,  $H$ : distancia entre la superficie el barril y la raíz del tornillo,  $L_s$ : distancia total entre aletas,  $D_s$ : Diámetro del tornillo desde el borde de la aleta,  $\delta_f$ : espacio entre la aleta y el barril y  $\theta$ : ángulo de hélice (formado entre la aleta y el plano normal del tornillo).

El desarrollo matemático para el tornillo de extrusión, inicia con el desenrollado del canal, pasando a ser un canal rectangular, cubierto por una placa plana infinita (el barril) como se observa en la figura 4., el cual es movido a velocidad constante de  $V_b = \pi N D_b$  con un ángulo ( $\theta_b$ ) en dirección  $z$ , como se observa en la figura 5.

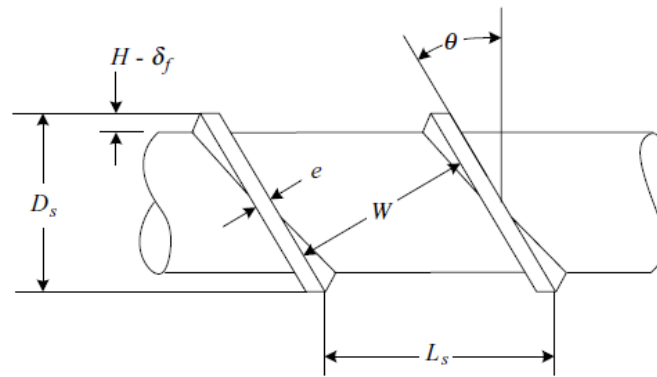


Figura 4. Geometría de un tornillo de extrusora. Tomado de Tadmor (2006).

Figura 12. Geometría del canal rectangular del tornillo desenrollado

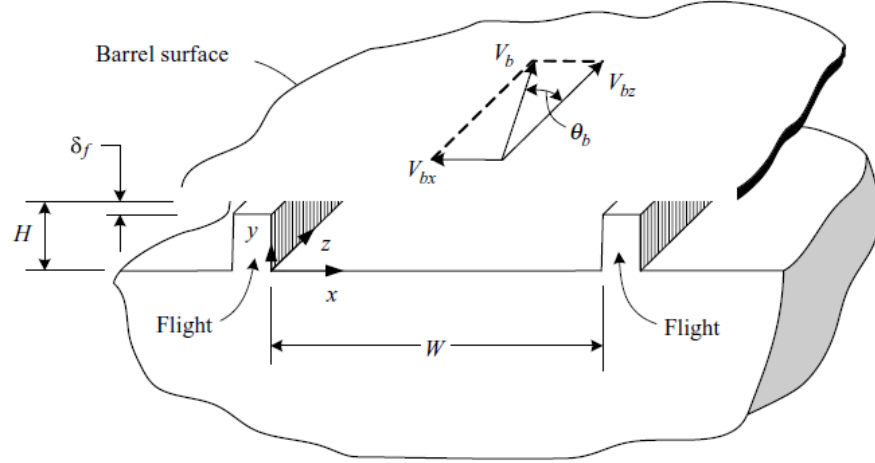


Figura 12. Geometría del canal rectangular del tornillo desenrollado. Tomado de Tadmor (2006).

La velocidad superficial del canal es separada en componentes hacia abajo y a través del canal, dadas por:

$$V_{bz} = V_b \cos \theta_b \quad (3.1 - 1a)$$

$$V_{bx} = V_b \sin \theta_b \quad (3.1 - 1b)$$

El flujo en la dirección z, se descompone en dos direcciones Vz (x,y), y la superficie del barril tiene una componente de velocidad en la dirección x que resultaría en un flujo circulatorio en la dirección transversal del canal. Para resolver este problema, se tienen en cuenta los supuestos que: el flujo y perfil de velocidad, están totalmente desarrollados. Teniendo en cuenta lo anterior, se plantea la Ecuación de Movimiento en coordenadas rectangulares (x,y,z):

$$\rho \left( V_x \frac{\delta V_x}{\delta x} + V_y \frac{\delta V_x}{\delta y} \right) = -\frac{\delta P}{\delta x} + \mu \left( \frac{\delta^2 V_x}{\delta x^2} + \frac{\delta^2 V_x}{\delta y^2} \right) \quad (3.2 a)$$

$$\rho \left( V_x \frac{\delta V_y}{\delta x} + V_y \frac{\delta V_y}{\delta y} \right) = -\frac{\delta P}{\delta y} + \mu \left( \frac{\delta^2 V_y}{\delta x^2} + \frac{\delta^2 V_y}{\delta y^2} \right) \quad (3.2 b)$$

$$\rho \left( V_x \frac{\delta V_z}{\delta x} + V_y \frac{\delta V_z}{\delta y} \right) = -\frac{\delta P}{\delta z} + \mu \left( \frac{\delta^2 V_z}{\delta x^2} + \frac{\delta^2 V_z}{\delta y^2} \right) \quad (3.2c)$$

Donde  $\rho$  es la densidad del fundido. En estas ecuaciones las componentes de la velocidad no son funciones de  $z$ , ya que el flujo es totalmente desarrollado. Si esto es asumido que el flujo en la dirección transversal del canal es también totalmente desarrollado, entonces  $\frac{\delta V_x}{\delta x} = \frac{\delta V_y}{\delta x} = \frac{\delta V_z}{\delta x} = 0$ ; por lo tanto, la forma de la ecuación de continuidad se obtiene que  $\frac{\delta V_z}{\delta y} = 0$ , y en combinación con la presente, que  $V_y = 0$ , por lo tanto, la ecuación (3.2b) se reduce a  $\frac{\delta P}{\delta y} = 0$  (componente  $y$ ), resultando en la presión  $P$ , siendo una función de  $x$  y  $z$  solamente, por lo tanto la ecuación (3.2-a) (componente  $x$ ):

$$\frac{\delta P}{\delta x} = \mu \frac{\delta^2 V_x}{\delta y^2} \quad (3.3)$$

En la ecuación (3.2-c) (componente  $z$ ), en el lado izquierdo representa los términos de aceleración, que en el caso de movimiento lento de un fluido viscoso, sería mucho menor que los términos que representan las fuerzas viscosas sobre el lado derecho de la ecuación. En una situación de flujo típico en la extrusora, la relación de inercia de las fuerzas viscosas es del orden de  $10^{-5}$ . Así que la ecuación se reducen a:

$$\frac{\delta P}{\delta z} = \mu \left( \frac{\delta^2 V_z}{\delta x^2} + \frac{\delta^2 V_z}{\delta y^2} \right) \quad (3.4)$$

La ecuación (3.1a) puede ser integrada para dar:

$$V_x = \frac{y^2}{2\mu} \left( \frac{\delta P}{\delta x} \right) + C_1 y + C_2 \quad (3.5)$$

Las constantes  $C_1$  y  $C_2$  son evaluadas desde las condiciones de contorno:

Las constantes  $C_1$  y  $C_2$  son evaluadas desde las condiciones de contorno:

$$V_x(0) = 0 \quad (3.6a)$$

$$V_x(H) = -V_{bx} \quad (3.6b)$$

Sustituyendo las condiciones de contorno en la ecuación (3.5) resulta:

$$u_x = -\xi + \xi(\xi - 1) \left( \frac{H^2}{2\mu V_{bx}} \frac{\partial P}{\partial x} \right) \quad (3.7)$$

Donde  $u_x = V_x/V_{bx}$  y  $\xi = y/H$ . Para un flujo transversal en el canal, aquí está la condición adicional de rata de flujo cero, siempre que se desprecia el flujo de perdida a través de las aletas. Expresando esta condición matemáticamente, se tiene:

$$\int_0^1 u_x d\xi = 0 \quad (3.8)$$

Ahora sustituyendo la ecuación (3.7) en la ecuación (3.8), resulta:

$$\frac{\delta P}{\delta x} = -6\mu \frac{\pi N D_b \sin \theta_b}{H^2} \quad (3.9)$$

Esta ecuación da el gradiente de presión a través del canal. Sustituyendo la ecuación (3.9) en la ecuación (3.7), el perfil de velocidad a través del canal es obtenido:

$$u_x = \xi(2 - 3\xi) \quad (3.10)$$

Conforme al perfil de velocidad, el cual mantiene solo cierta distancia entre las aletas, el fluido circulante alrededor de la capa estancada está a 2/3 de la altura del canal.

En la dirección hacia abajo del canal el perfil de velocidad es obtenido por la solución de la ecuación diferencial parcial (3.4). Esto muestra que el gradiente de presión  $\delta P/\delta z$  es una constante, las condiciones de contorno son:

$$V_z(x, 0) = 0 \quad (3.11a)$$

$$V_z(x, H) = V_{bz} \quad (3.11b)$$

$$V_z(0, y) = 0 \quad (3.11c)$$

$$V_z(W, y) = 0 \quad (3.11d)$$

La solución para la velocidad hacia dentro del canal del tornillo, por separación de variables es:

$$u_z = \frac{4}{\pi} \sum_{i=1,3,5}^{\infty} \frac{\sinh(i\pi h \xi)}{i \sinh(i\pi h)} \sinh(i\pi \chi) - \left( \frac{H^2}{2\mu V_{bx}} \frac{\partial P}{\partial x} \right) \cdot \left[ \xi^2 - \xi + \frac{8}{\pi^3} \sum_{i=1,3,5}^{\infty} \frac{\cosh[i\pi(\chi - 0.5/h)]}{i^3 \cosh(i\pi/2h)} \sin(i\pi \xi) \right] \quad (3.12)$$

Donde  $u_z = V_z/V_{bz}$ ,  $\chi = x/W$  y  $h = H/W$

Ahora bien, la rata de flujo ( $Q_z$ ), es obtenida por integración de la componente  $V_z$  hacia abajo del canal, dada en la ecuación (3.2c) a través del canal,

$$Q = WHV_{bz} \iint u_z d\xi d\chi \quad (3.13)$$

Integrando esta expresión da la siguiente ecuación:

$$Q = \frac{V_{bz}WH}{2} F_d + \frac{WH^3}{12\mu} \left( -\frac{\delta P}{\delta z} \right) F_p \quad (3.14)$$

Donde  $F_d$  (factor de forma para el flujo de arrastre) y  $F_p$  son (factores de forma para la presión de flujo). Ellos toman valores que son más pequeños que 1, representando el efecto reducido de las aletas sobre la rata de flujo ( $Q_z$ ), entre placas paralelas infinitas, ellos están dados por:

$$F_d = \frac{16}{\pi^3 H} \sum_{i=1,3,5}^{\infty} \frac{1}{i^3} \tanh\left(\frac{i\pi H}{2W}\right) \quad (3.15)$$

$$F_p = 1 - \frac{192H}{\pi^5 W} \sum_{i=1,3,5}^{\infty} \frac{1}{i^5} \tanh\left(\frac{i\pi W}{2H}\right) \quad (3.16)$$

Donde, W: ancho (inclinado) del canal entre aletas y H: distancia entre la superficie el barril y la raíz del tornillo.

Así esta es la solución de una ecuación diferencial lineal, está compuesta de dos términos independientes, el 1) representa la contribución del flujo de arrastre y el 2) la presión de flujo. Estos dos términos son independientes cada uno del otro. Un incremento positivo en el gradiente de presión, podría incrementar la presión del contraflujo. Este decrece la rata de flujo neto, a pesar de un flujo de arrastre que no cambia.

Ahora, la relación de presión y rata lenta de arrastre es obtenida por la ecuación (2.3.3.1 – 14)

$$-\frac{Q_p}{Q_d} = \frac{H^2}{6\mu V_{bz}} \left( \frac{\delta P}{\delta z} \right) \frac{F_p}{F_d} \quad (3.17)$$

El perfil de velocidad en dirección axial está dado por;

$$v_l = v_x \cos \theta + v_y \sin \theta \quad (3.18)$$

Sustituyendo las ecuaciones (3.10) y (3.12) en la ecuación (3.17) y usando las ecuaciones (3.13) a (3.16), obtenemos:

$$u_l = 3\xi(\xi - 1) \left(1 + \frac{Q_p}{Q_d}\right) \sin \theta \cos \theta \quad (3.19)$$

Donde  $u_l = v_l/V_b$ . Para el ángulo de hélice entre 0 y  $\pi/2$ , no existe en ningún caso un contraflujo  $u_l$  en la dirección axial. Para la descarga cerrada ( $Q = 0$ ),  $u_l$  se vuelve cero para todos los valores de  $\xi$ . La máxima velocidad, la cual ocurre en la mitad del canal ( $\xi=0,5$ ), cambia desde cero en el caso de que no haya salida para:

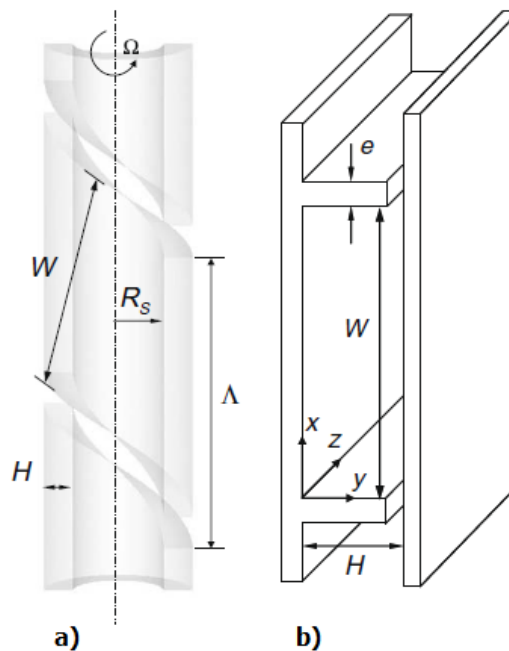
$$u_{l,max} = \frac{3 \sin \theta \cos \theta}{4} \quad (3.20)$$

Para un flujo de arrastre puro. Para este caso la velocidad  $u_l$  a cualquier  $\xi$ , alcanzaría un máximo valor en  $\theta = \frac{\pi}{4}$ . El perfil de velocidad  $u_x$  es independiente de la relación  $\frac{Q_p}{Q_d}$ . Para un rendimiento cero, ambos  $u_x$  y  $u_z$  asumen valores de cero en el mismo punto  $\xi = \frac{2}{3}$ . En otras palabras, bajo esas condiciones las partículas de fluido en esta posición sería estacionario.

### 3.1.2 Modelo Analítico de Li - Hsieh

Este modelo presenta una solución analítica de un Flujo Isotérmico Newtoniano en una extrusora de tornillo único con canal finito. Para simplificar el problema, la curvatura del tornillo es asumida como pequeña, de manera que la superficie del barril y los canales del tornillo puedan ser desenrollados, volviéndose el problema: (1) el flujo es laminar, (2) el flujo es isotérmico, (3) el fluido es Newtoniano e incompresible, (4) las fuerzas gravitacionales son despreciadas, (5) el flujo es totalmente desarrollado y (6) no hay deslizamiento en las paredes (Li et al., 1995).

Figura 14. a) Parámetros y b) geometría del tornillo de la extrusora.



Tomado y modificado de Vinisius et al., (2009).

En la figura 13a., se muestran los parámetros del tornillo, donde:  $W$ : ancho del canal entre aletas,  $e$ : ancho de la aleta,  $H$ : distancia entre la superficie del tornillo y el barril y  $R_s$ : Radio del corazón del tornillo.

Teniendo en cuenta las simplificaciones (1) a (6), expuestas anteriormente, la Ecuación de Movimiento en coordenadas rectangulares ( $x$ ,  $y$ ,  $z$ ), se reduce a:

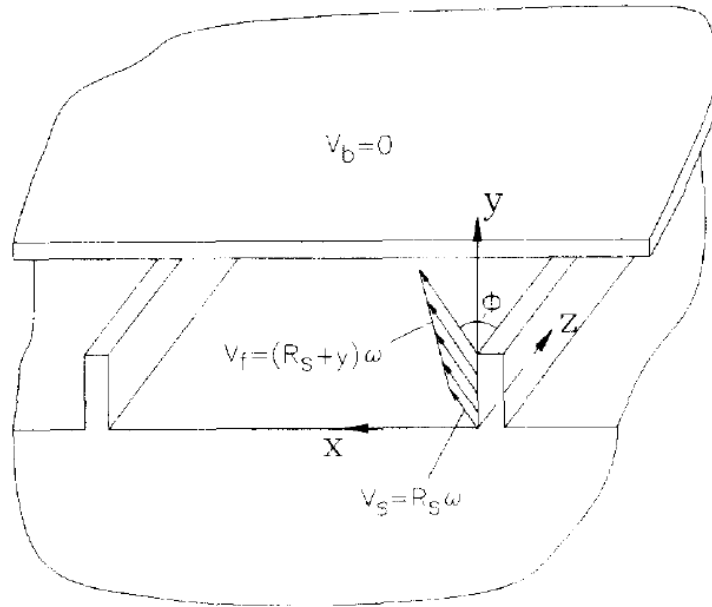
Componente en z: 
$$\frac{\delta P}{\delta z} = \mu \left( \frac{\delta^2 v_z}{\delta x^2} + \frac{\delta^2 v_z}{\partial y^2} \right) \quad (3.21a)$$

Componente en y: 
$$\frac{\delta P}{\delta y} = \mu \left( \frac{\delta^2 v_y}{\delta x^2} + \frac{\delta^2 v_y}{\partial y^2} \right) \quad (3.21b)$$

Componente en x: 
$$\frac{\delta P}{\delta x} = \mu \left( \frac{\delta^2 v_x}{\delta x^2} + \frac{\delta^2 v_x}{\partial y^2} \right) \quad (3.21c)$$

Donde x, y y z son coordenadas del ancho del canal (W), profundidad del canal (H) y hacia abajo del canal (z), respectivamente.

Figura 15. Representación esquemática del tonillo desenrollado y del sistema del barril de la extrusora.



Tomado de Li et al., (1996).

Asumiendo que  $v_y = 0$ , con un supuesto razonable para el tornillo con una relación profundidad/ancho pequeña ( $H/W$ ), y usando la ecuación de continuidad; entonces:  $\delta v_y / \delta x \approx 0$ ,  $\delta v_x / \delta x \approx 0$  y  $\delta v_y / \delta y \approx 0$ . Entonces, las ecuaciones (2.3.3.1 – 21a) al (2.3.3.1 – 21c) se vuelven:

$$\frac{\delta P}{\delta z} = \mu \left( \frac{\delta^2 v_z}{\delta x^2} + \frac{\delta^2 v_z}{\partial y^2} \right) \quad (3.22a)$$

$$\frac{\partial P}{\partial y} \approx 0 \quad (3.22b)$$



$$\frac{\partial P}{\partial x} \approx \mu \frac{\delta^2 v_x}{\delta y^2} \quad (3.22c)$$

Para extrusoras con tornillo rotatorio y barril estacionario, las siguientes ecuaciones de contorno podrían ser usadas para resolver la ecuación (3.22a), para el flujo hacia abajo del canal:

$$\text{Barril:} \quad v_z(x, H) = 0 \quad (3.23a)$$

$$\text{Base del tornillo:} \quad v_z(x, 0) = R_s \omega \cos \phi_b \quad (3.23b)$$

$$\text{Aletas del tornillo:} \quad v_z(0, y) = (R_b + y) \omega \cos \phi_b \quad (3.23c)$$

$$v_z(W, y) = (R_b + y) \omega \cos \phi_b \quad (3.23d)$$

El desarrollo de la ecuación (3.22a) la presenta Li et al., (1995), y la solución final para la velocidad de flujo hacia dentro del canal, está dada por:

$$v_z = R_s \omega \cos \phi_b f_{V1} + (2R_b - H) \omega \cos \phi_b f_{V2} + \frac{1}{\mu} \frac{\delta P}{\delta z} \cdot (aW^2 f_{V3} + bH^2 f_{V4}) \quad (3.24)$$

Donde, a y b son constantes dependientes de la relación  $H/W$ . Cuando la relación  $H/W$  es pequeña  $a=0$  y  $b=1$ , cuando la relación  $H/W$  es grande,  $a=1$  y  $b=0$ .  $R_b$ : Radio interno del barril y  $H$ : distancia entre la superficie el barril y  $f_{V1}, f_{V2}, f_{V3}, f_{V4}$  son coeficientes para la ecuación (3.24), entonces:

$$f_{V1} = \frac{4}{\pi} \sum_{i=1,3,5,\dots}^{\infty} \frac{\sin \frac{i\pi x}{W}}{i} \frac{\sinh \left( \frac{i\pi(H-y)}{W} \right)}{\sinh \frac{i\pi H}{W}} \quad (3.25a)$$

$$f_{V2} = \frac{2}{\pi} \sum_{i=1,3,5,\dots}^{\infty} \frac{\sin \frac{i\pi y}{H}}{i} \frac{\sinh \left( \frac{i\pi(W-x)}{H} \right) + \sinh \frac{i\pi x}{H}}{\sinh \frac{i\pi W}{H}} \quad (3.25b)$$

$$f_{V3} = \frac{4}{\pi^3} \sum_{i=1,3,5,\dots}^{\infty} \frac{\sin \frac{i\pi x}{W}}{i^3} \left[ \frac{\sinh \left( \frac{i\pi(H-y)}{W} \right) + \sinh \frac{i\pi x}{W}}{\sinh \frac{i\pi H}{W}} - 1 \right] \quad (3.25c)$$

$$f_{V4} = \frac{4}{\pi^3} \sum_{i=1,3,5,\dots}^{\infty} \frac{\sin \frac{i\pi y}{H}}{i^3} \left[ \frac{\sinh \left( \frac{i\pi(W-x)}{H} \right) + \sinh \frac{i\pi x}{H}}{\sinh \frac{i\pi W}{H}} - 1 \right] \quad (3.25d)$$

Para el flujo a través del canal,  $v_x$ , la ecuación (3.22c), se integra doblemente para producir:

$$v_x = \frac{\delta P}{\delta x} \frac{y^2}{2\mu} + C_1 y + C_2 \quad (3.26)$$

Las constantes  $C_1$  y  $C_2$ , son resueltas por las siguientes condiciones de contorno:

$$v_x(H) = 0 \quad (3.27)$$

$$v_x(0) = -R_s \omega \sin \phi_b \quad (3.28)$$

Entonces, la ecuación (3.27), para  $v_x$  se vuelve:

$$v_x = \frac{\delta P}{\delta x} \frac{(y^2 - Hy)}{2\mu} - R_s \omega \sin \phi_b \frac{H-y}{H} \quad (3.29)$$

En la ecuación (3.30), el gradiente de presión  $\delta P/\delta x$  es usualmente no conocido. En orden para evaluar este gradiente de presión,  $v_x$  puede ser integrada para encima de la profundidad del canal H:

$$\int_0^H v_x dy = -\frac{H^3}{12\mu} \frac{\delta P}{\delta x} - \frac{R_s \omega \sin \phi_b H}{2} = Q_{perdida} \quad (3.30)$$

$$\frac{\partial P}{\delta x} = -\frac{12\mu}{H^3} \left[ Q_{perdida} - \frac{R_s \omega \sin \phi_b H}{2} \right] \quad (3.31)$$

Claramente  $\delta P/\delta x$  no solamente depende de la geometría del tornillo y de la viscosidad del fluido, sino también del espacio entre la punta del tornillo y el barril. Sustituyendo la ecuación (3.31), nuevamente en la ecuación (3.30), la velocidad a través del canal  $v_x$ , se vuelve:

$$v_x = \frac{R_s \omega \sin \phi_b (H-y)}{H} \left[ 3 \frac{y}{H} - 1 \right] + \frac{6Q_{perdida}[Hy-y^2]}{H^3} \quad (3.32)$$

La geometría del tornillo es dada y el flujo de perdidas  $Q_{perdidas}$  es conocido, el perfil de velocidad  $v_x$ , puede ser determinado. Desafortunadamente  $Q_{perdidas}$  es difícil de evaluar. Las ecuaciones para calcular  $Q_{perdidas}$  están disponibles en la literatura, por Tadmor y Gogos (1979) como también por Rauwendaal (1986, 1988), sin embargo las ecuaciones no han sido verificadas con datos experimentales.

Para el diseño de extrusora y la simulación del proceso de extrusión, la relación entre la rata de flujo y la presión es de gran interés. Por integración de la velocidad hacia abajo del canal,  $v_x(x, y)$  (ecuación 2.3.3.1 -25) arriba del área de sección transversal del canal, la rata de flujo ( $Q_z$ ), general puede ser obtenido por:

$$Q_z = R_s \omega \cos \phi_b W^2 f_{Q1} + (2R_b - H) \omega \cos \phi_b H^2 f_{Q2} + \frac{a}{\mu} \frac{\delta P}{\delta z} \left( W^4 f_{Q3} - \frac{W^3 H}{12} \right) + \frac{b}{\mu} \frac{\delta P}{\delta z} \left( H^4 f_{Q4} - \frac{H^3 H}{12} \right) \quad (3.33)$$

Donde,  $f_{Q1}, f_{Q2}, f_{Q3}, f_{Q4}$  son coeficientes de la ecuación (3.24),

$$f_{Q1} = \frac{8}{\pi^3} \sum_{i=1,3,5...}^{\infty} \frac{1}{i^3} \left[ \frac{\cosh \frac{i\pi H}{W} - 1}{\sinh \frac{i\pi H}{W}} \right] \quad (3.34a)$$

$$\frac{8}{\pi^3} \sum_{i=1,3,5...}^{\infty} \frac{1}{i^3} \left[ \frac{\cosh \frac{i\pi W}{H} - 1}{\sinh \frac{i\pi W}{H}} \right] \quad (3.34b)$$

$$f_{Q3} = \frac{16}{\pi^5} \sum_{i=1,3,5...}^{\infty} \frac{1}{i^5} \left[ \frac{\cosh \frac{i\pi H}{W} - 1}{\sinh \frac{i\pi H}{W}} \right] \quad (3.4c)$$

$$f_{Q4} = \frac{8}{\pi^5} \sum_{i=1,3,5...}^{\infty} \frac{1}{i^5} \left[ \frac{\cosh \frac{i\pi W}{H} - 1}{\sinh \frac{i\pi W}{H}} \right] \quad (3.4d)$$

Según Rowell y Finlayson (1928), cuando  $H/W < 1$ , un caso común en la extrusora de tornillo único, el coeficiente  $f_{Q2}$ , se volverá 0,271377272 y  $f_{Q4}$  converge a 0,05252075. Sin embargo, por ajuste  $a=0$  y  $b=1$ , y reareglando la ecuación (3.33), la rata de flujo ( $Q_z$ ), puede ser simplificada por:

$$Q_z = R_b^3 \omega (F_s + F_w) - \frac{R_b^4}{\mu} \frac{\delta P}{\delta z} F_p \quad (3.36)$$

Donde,  $F_s$ : factor de forma del flujo de arrastre causado por la raíz del tornillo,  $F_w$ : factor de forma del flujo de arrastre causado por la pared del barril,  $F_p$ : factor de forma de la presión y  $n_t$ : número de pasos.

$$F_s = \frac{(1-H/R_b) \sin^2 \phi_b \cos \phi_b}{n_t} \left( 2\pi - \frac{e n_t}{R_b \tan \phi_b} \right)^2 f_{Q1} \quad (3.37)$$

$$F_w = 0,271377272 n_t \cos \phi_b \cdot \left( \frac{H}{R_b} \right)^2 \left( 2 - \frac{H}{R_b} \right)^4 \quad (3.38)$$

$$F_p = \frac{1}{12} \left( \frac{H}{R_b} \right)^3 \cdot \left( \frac{2\pi \tan \phi_b}{n_t} - \frac{e}{R_b} \right) - 0,05252075 \left( \frac{H}{R_b} \right)^4 \quad (3.39)$$

Para una mejor exactitud,  $f_{Q1}$  es evaluada usando el rendimiento del radio o,

$$f_{Q1} = \frac{8}{\pi^3} \sum_{i=1,3,5...}^{\infty} \frac{1}{i^3} \left[ \frac{\cosh \frac{i\pi H}{W_a} - 1}{\sinh \frac{i\pi H}{W_a}} \right] \quad (3.40)$$

Donde,  $W_a$ : ancho promedio del canal en la dirección x.

$$W_a = \left( \frac{\pi(2R_b-H) \tan \phi_b}{n_t} - e \right) \cos \phi_b \quad (3.41)$$

$$f_{Q1} = 0,5 \left( \frac{H}{W} \right) - 0,3151 \left( \frac{H}{W} \right)^2 \quad (3.42)$$

Un análisis detallado de  $F_s$  y  $F_w$  puede ser encontrado en Li y Hsieh (1994). Para el caso de  $H/W > 1$ , este es conveniente hacerlo  $a=1$  y  $b=1$  en la ecuación (3.35) y los factores  $f_{Q2}$ ,  $f_{Q3}$  y  $f_{Q4}$ , pueden ser calculados de manera similar, que  $f_{Q1}$ .

Por definición la rata de flujo  $Q_z^*$  y la presión  $P_z$  como:

$$Q_z^* = \frac{Q_z}{R_b \omega \cos \phi_b W H} \quad (3.43)$$

$$P_z = \frac{1}{\mu} \frac{\delta P}{\delta z} \frac{H^2}{R_b \omega \cos \phi_b} \quad (3.44)$$

La ecuación para características del tornillo, está dada por:

$$Q_z^* = F_d^* - F_p^* P_z \quad (3.45)$$

$$F_d^* = \frac{1-H/R_b}{H/R_b} \left[ \frac{2\pi \tan \phi_b}{n_t} - \frac{e}{R_b} \right] f_{Q1} + \frac{0,21377272 H/R_b (2-H/R_b)}{\left( \frac{2\pi \tan \phi_b}{n_t} - \frac{e}{R_b} \right) \cos \phi_b} \quad (3.46)$$

Donde  $F_d^*$  es dimensión máxima para la rata de flujo ( $Q_z$ ), dada por la ecuación (3.46):

$$F_p^* = \frac{1}{12} + \frac{0,05252075 H/R_b}{\left( \frac{2\pi \tan \phi_b}{n_t} - \frac{e}{R_b} \right) \cos \phi_b} \quad (3.47)$$

Donde  $F_p^*$  es el efecto de la presión de flujo.

## Anexo 2. FORMULACIONES DE MEZCLAS TPS/PLA

**Tabla 8. Cálculos para formulación F0**

Formulación F0					
Componentes	Propiedades				
	$\rho$ (g/ml)	m (g)	V (ml)	vi	wi
PLA Seco					
Almidón seco	1.56	600	384.62	0.54	0.60
Glicerina	1.2452	390	313.20	0.44	0.39
Ácido Esteárico	0.87	10	11.49	0.02	0.01
GTPS	3.68	1000	709.31	1.00	1.00
GTPS/PLA					

**Tabla 9. Cálculos para formulación F1**

Formulación F1					
Componentes	Propiedades				
	$\rho$ (g/ml)	m (g)	V (ml)	vi	wi
PLA seco	1.24	200	161.29	0.22	0.20
Almidón seco	1.56	480	307.69	0.42	
Glicerina	1.2452	312	250.56	0.34	
Ácido Esteárico	0.87	8	9.20	0.01	
GTPS	3.68	800	567.45	0.78	0.80
GTPS/PLA	3.14	1000	728.74	1.00	1.00

**Tabla 10. Cálculos para formulación F2**

Formulación F2					
Componentes	Propiedades				
	$\rho$ (g/ml)	m (g)	V (ml)	vi	wi
PLA seco	1.24	400	322.58	0.43	0.40
Almidón seco	1.56	360	230.77	0.31	
Glicerina	1.2452	243	195.15	0.26	
Ácido Esteárico	0.87	6	6.90	0.01	
GTPS	3.68	600	432.82	0.57	0.60
GTPS/PLA	2.64	1000	755.40	1.00	1.00

**Tabla 11. Cálculos para formulación F3**

Formulación F3					
Componentes	Propiedades				
	$\rho$ (g/ml)	m (g)	V (ml)	vi	wi
PLA seco	1.24	600	483.87	0.63	0.60
Almidón seco	1.56	240	153.85	0.20	
Glicerina	1.2452	156	125.28	0.16	
Ácido Esteárico	0.87	4	4.60	0.01	
GTPS	3.68	400	283.72	0.37	0.40
GTPS/PLA	2.14	1000	767.60	1.00	1.00

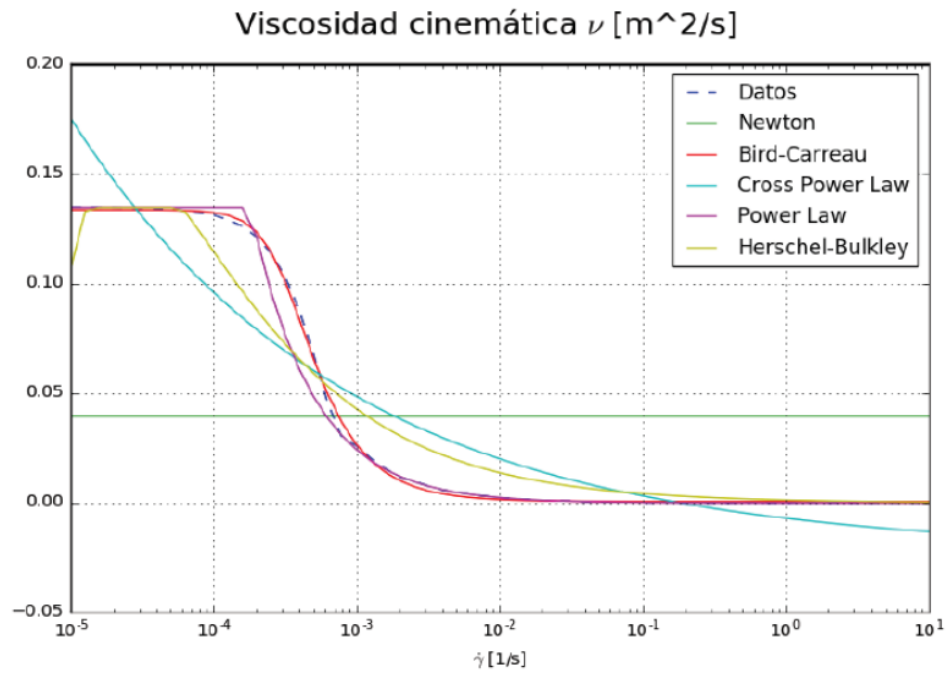
**Tabla 12. Cálculos para formulación F4**

Formulación F4					
Componentes	Propiedades				
	$\rho$ (g/ml)	m (g)	V (ml)	vi	wi
PLA seco	1.24	800	645.16	0.82	0.60
Almidón seco	1.56	120	76.92	0.10	
Glicerina	1.2452	78	62.64	0.08	
Ácido Esteárico	0.87	2	2.30	0.003	
GTPS	3.68	200	54.42	0.18	0.40
GTPS/PLA	1.68	1000	787.02	1.00	1.00

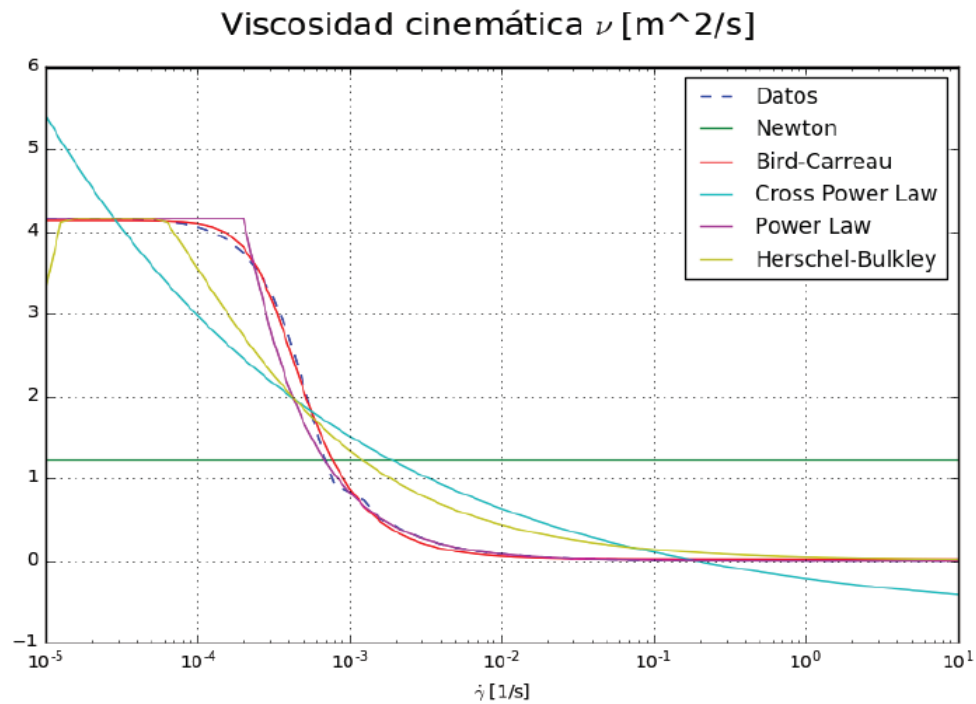
**Tabla 13. Cálculos para formulación F5**

Formulación PLA					
Componentes	Propiedades				
	$\rho$ (g/ml)	m (g)	V (ml)	vi	wi
PLA seco	1.24	1000	806.45	1.00	1.00
Almidón seco	0	0			
Glicerina	0	0			
Ácido Esteárico	0	0			
GTPS	0	0			
GTPS/PLA	0	0			

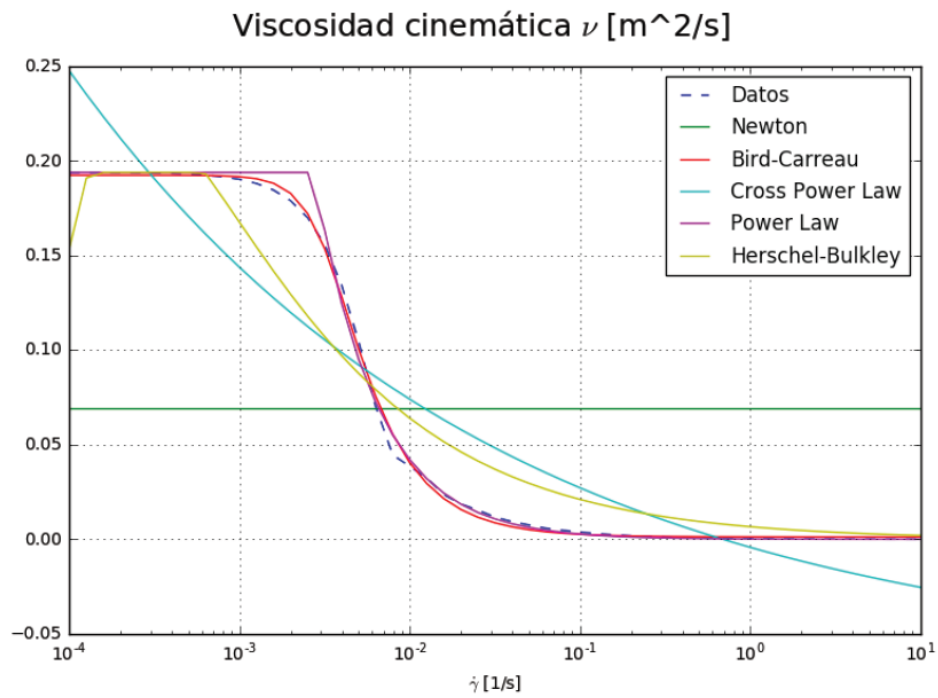
### Anexo 3. Comportamiento mezclas TPS/PLA fundidas



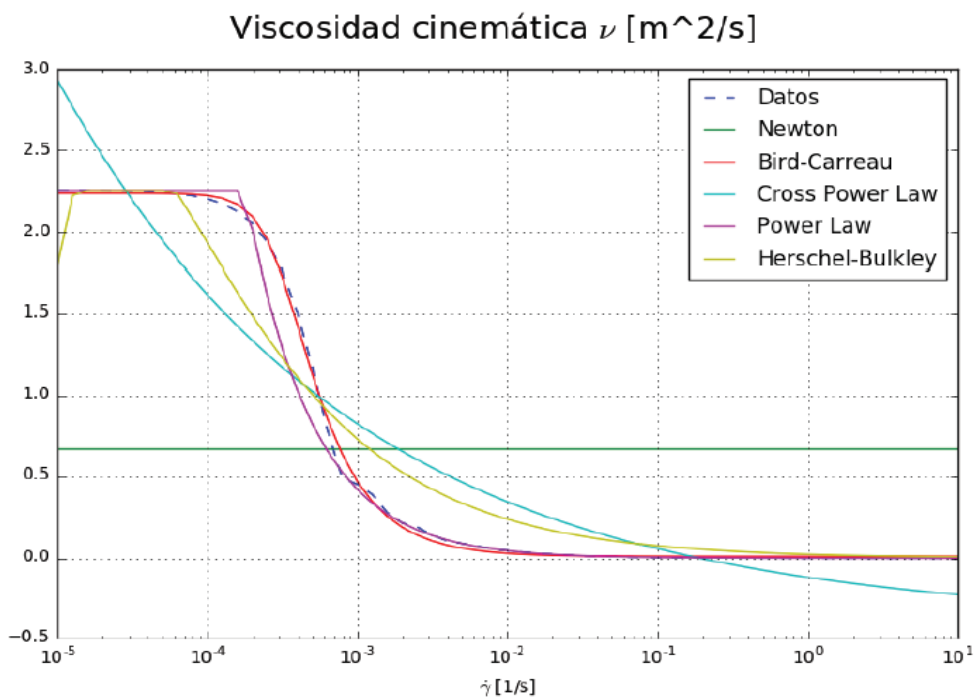
Sección 4.3. Figura 1. Comportamiento TPS.



Sección 4.3. Figura 2. Comportamiento PLA.

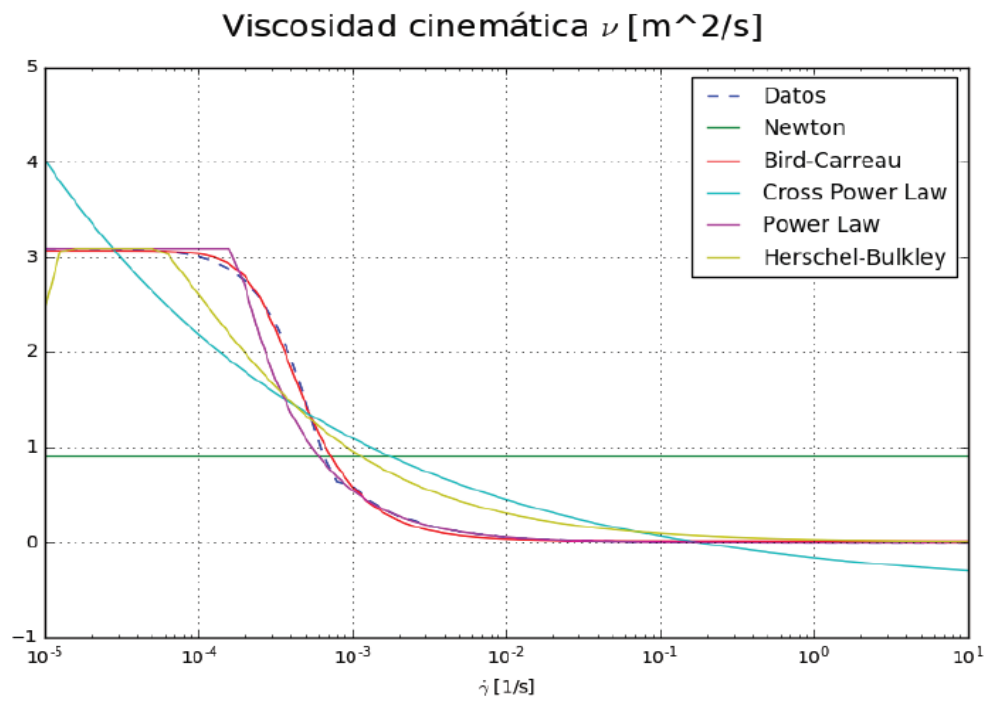


Sección 4.3. Figura 2. Comportamiento F1.

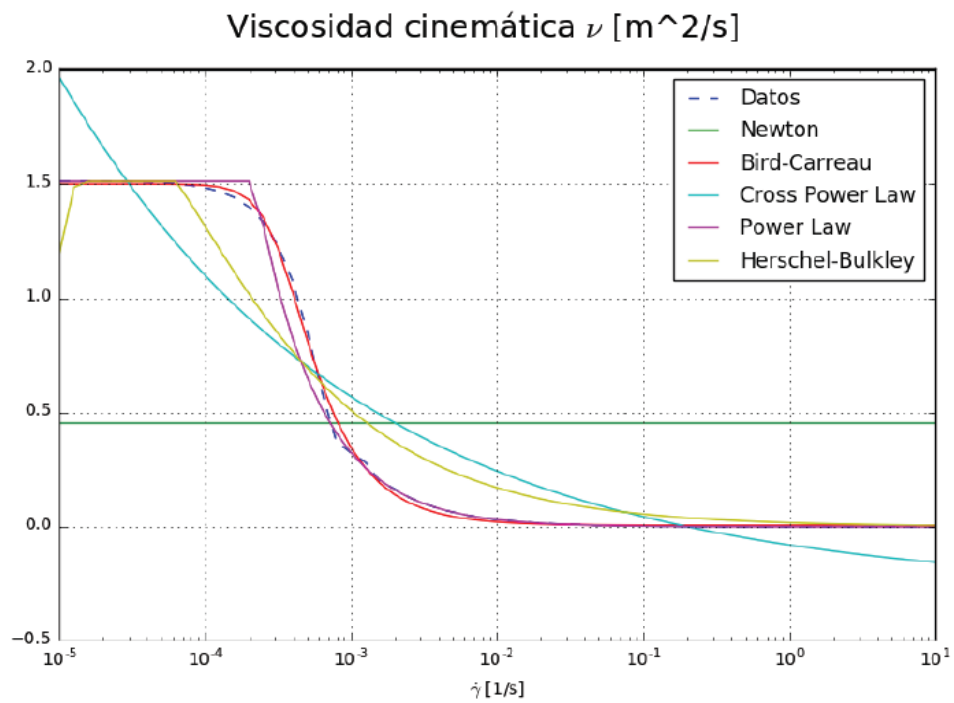


Sección 4.3. Figura 3. Comportamiento F2.





Sección 4.3. Figura 4. Comportamiento F3.



Sección 4.3. Figura 5. Comportamiento F4.